



UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE PROCESSOS

Alysson Dantas Ferreira

ESTUDO DA PIRÓLISE DO BAGAÇO DA CANA-DE-AÇÚCAR EM LEITO DE
JORRO: MODELAGEM, SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO CFD

Campina Grande - PB

2023

ESTUDO DA PIRÓLISE DO BAGAÇO DA CANA-DE-AÇÚCAR EM LEITO DE
JORRO: MODELAGEM, SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO CFD

Alysson Dantas Ferreira

Tese de Doutorado apresentado ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos, da Universidade Federal de Campina Grande, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia de Processos.

Orientador: Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto

Campina Grande - PB

Agosto de 2023

F383e

Ferreira, Alysson Dantas.

Estudo da pirólise do bagaço da cana-de-açúcar em leito de jorro: modelagem, simulação e otimização CFD / Alysson Dantas Ferreira. - Campina Grande, 2023.

129 f. : il. color.

Tese (Doutorado em Engenharia de Processos) - Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2023.

"Orientação: Prof. Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto."

Referências.

1. Pirólise. 2. Cana-de-açúcar. 3. Modelagem. 4. CFD. I. Farias Neto, Severino Rodrigues de. II. Título.

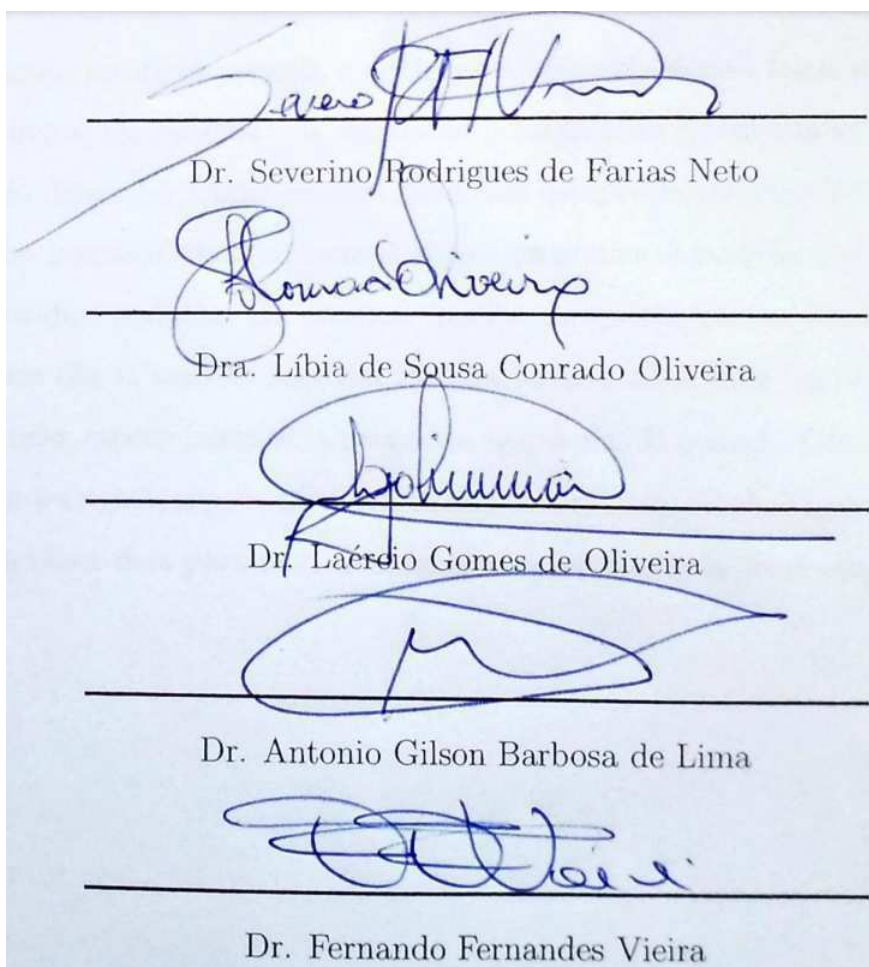
CDU 66.092-977(043)

ESTUDO DA PIRÓLISE DO BAGAÇO DA CANA-DE-AÇÚCAR EM LEITO DE
JORRO: MODELAGEM, SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO CFD

Alysson Dantas Ferreira

TESE SUBMETIDA AO PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA
DE PROCESSOS DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE COMO
PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIO PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOU-
TOR EM ENGENHARIA DE PROCESSOS.

Tese apresentada e aprovada em 04/08/2023, pela banca examinadora constituída pelos
professores:



Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto

Dra. Líbia de Sousa Conrado Oliveira

Dr. Laércio Gomes de Oliveira

Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima

Dr. Fernando Fernandes Vieira

Campina Grande, PB - Brasil

Agosto de 2023

Dedicatória

Dedico este trabalho a minha saudosa avó, Maria das Neves Cardoso Ferreira (In Memoriam). Quando estava viva, tínhamos uma relação muito próxima e passávamos horas conversando sobre os mais diversos assuntos. Em algumas dessas conversas, ela sempre me falava do seu desejo de um dia me ver como médico, juiz ou advogado. Sabendo que eu não me interessava por essas profissões, apenas sorria. Certa vez, perguntei de onde vinha esse desejo e a resposta foi simples: ‘Quero que você seja um Doutor’. Para ela, esse título simbolizava um grande prestígio perante a sociedade. Quando decidi fazer o vestibular para engenharia química, ela foi uma das primeiras pessoas para quem contei. Sua reação não poderia ter sido diferente. Como sempre fazia, ela compreendeu e apoiou minha decisão. Essa foi uma das nossas últimas conversas, pois alguns dias depois ela veio a falecer. Nesse dia, ela me fez dois pedidos. Eu prometi que os cumpriria, juntamente com uma terceira promessa: um dia as pessoas também me chamariam de doutor, como ela tanto desejava. Com esta tese, espero cumprir a promessa que a fiz. E quando Deus permitir que nos encontremos novamente, espero encontrá-la com seu sorriso, receber mais um de seus abraços e olhar nos olhos dela para ouvi-la dizer que cumpri as três promessa que fiz.

Agradecimentos

Agradeço a Deus pela saúde e pela coragem de seguir em frente com os meus objetivos e não desanimar com as dificuldades.

A minha esposa Aline Mirely, que me acompanhou desde o início e que junto comigo, abdicou de vários finais de semana, férias e feriados para que eu pudesse concluir este trabalho. Sua compreensão, paciência e companheirismo foram fundamentais durante todo esse árduo período.

Agradeço aos meus pais, Alcilene Dantas da Silva e Severino Ferreira Filho, e também aos meus irmãos Anderson Dantas e Suzana Dantas. Durante todo o processo de estudo e dedicação, eles sempre compreenderam as minhas ausências e momentos de afastamento e reclusão, mostrando-me o quão crucial era investir no meu aprendizado.

Ao meu orientador, professor e amigo, Severino Rodrigues de Farias Neto, pelos seus sábios ensinamentos, amizade, confiança e sua sempre valiosa orientação.

Agradeço também aos membros da banca, Líbia de Sousa Conrado Oliveira, Laércio Gomes de Oliveira, Antonio Gilson Barbosa de Lima e Fernando Fernandes Vieira por terem aceito o convite, colocando-se a disposição para avaliar e contribuir com este trabalho.

Aos incríveis amigos que o doutorado me proporcionou, Jéssica Barbosa e Raniere Costa. Mesmo com o fim do doutorado, espero que nossa amizade continue a crescer e que possamos celebrar muitas conquistas futuras.

Agradeço a Universidade Federal de Campina Grande, ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos, bem como seus professores e funcionários, que se dedicam diariamente para possibilitar a formação de novos mestres e doutores.

Por fim, desejo exprimir os meus agradecimentos a todos aqueles que, de alguma forma, permitiram que esta tese se concretizasse.

“Este não é o fim. Não é sequer o
começo do fim. Mas é, talvez, o fim
do começo.”

Winston Churchill

Resumo da Tese apresentada à PPGE/UFMG como parte dos requisitos necessário para a obtenção do grau de Doutor em Engenharia de Processos (D.Sc)

ESTUDO DA PIRÓLISE DO BAGAÇO DA CANA-DE-AÇÚCAR EM LEITO DE JORRO: MODELAGEM, SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO CFD

Alysson Dantas Ferreira

Agosto/2023

Orientador: Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto

Programa: Engenharia de Processos

O Brasil é o maior produtor mundial de cana-de-açúcar e seu bagaço é uma importante fonte de biomassa, capaz de ser convertida em energia renovável através de processos como a pirólise. O desenvolvimento de modelos matemáticos que a representem é essencial na otimização desse processo. Nesse sentido, este trabalho avaliou como a localização da injeção das partículas de biomassa e como os parâmetros operacionais afetam as taxas de conversão das reações de pirólise em um leito de jorro. Para isso, foi proposto um modelo em CFD com abordagem Euleriano-Lagrangiano, no qual foi simulado usando o OpenFOAM. Inicialmente, simulou-se a pirólise de única partícula com um mecanismo cinético semiglobal de dois estagio. Posteriormente, alterou-se o mecanismo cinético para considerar a composição da biomassa. Em uma terceira etapa, simulou-se apenas o comportamento do leito de partícula inerte. Essas três etapas validaram o modelo proposto. De posse dessa modelagem, explorou-se diferentes localizações de entrada de biomassa e com base na melhor configuração geométrica, realizou-se um planejamento fatorial numérico do tipo 2^k para investigar a influência da temperatura do gás, velocidade do gás e diâmetro das partículas de biomassa na reação de pirólise. Os resultados numéricos foram confrontados e validados com dados experimentais reportados pela literatura. Referente a configuração geométrica do reator, identificou-se a entrada próxima à base do equipamento a que apresentou o melhor resultado. Quanto ao DoE, observou-se que a temperatura e o diâmetro das partículas apresentam uma forte influência no comportamento das reações. Por fim, o cenário de maior conversão de biomassa foi obtido para uma temperatura de 600°C, uma velocidade de 142 m/s e um diâmetro de biomassa de $1,0 \times 10^{-3}$ m, no qual foi encontrado uma conversão de 84,35 %.

Palavras-chave: DoE, OpenFOAM, Euleriano, Lagrangiano.

Abstract of the Thesis presented to PPGE/UFMG as part of the fulfillment of the requirements for the degree of Doctor in Process Engineering (D.Sc).

STUDY OF THE PYROLYSIS OF SUGARCANE BAGASSE IN A SPOUTED BED:
MODELING, SIMULATION, AND CFD OPTIMIZATION.

Alysson Dantas Ferreira

August/2023

Advisor: D.Sc. Severino Rodrigues de Farias Neto

Department: Process Engineering

Brazil is the world's largest sugarcane producer, and its bagasse is a significant source of biomass that can be converted into renewable energy through processes like pyrolysis. Developing mathematical models to represent this process is crucial for optimization. In this context, this study assessed how the injection location of biomass particles and operational parameters affect the conversion rates of pyrolysis reactions in a fluidized bed. To achieve this, a Computational Fluid Dynamics (CFD) model with an Eulerian-Lagrangian approach was proposed and simulated using OpenFOAM. Initially, single-particle pyrolysis was simulated with a two-stage semi-global kinetic mechanism. Subsequently, the kinetic mechanism was modified to account for biomass composition. In the third phase, the behavior of the inert particle bed was simulated, validating the proposed model through these three steps. With this model in hand, different biomass injection locations were explored. Based on the optimal geometric configuration, a numerical factorial 2^k design of experiments (DoE) was conducted to investigate the influence of gas temperature, gas velocity, and biomass particle diameter on pyrolysis reactions. Numerical results were compared and validated against experimental data reported in the literature. Regarding the reactor's geometric configuration, the entry point near the base of the equipment yielded the best results. In terms of the DoE, it was observed that temperature and particle diameter significantly influence reaction behavior. Ultimately, the highest biomass conversion scenario was achieved at a temperature of 600°C, gas velocity of 142 m/s, and biomass particle diameter of 1.0×10^{-3} m, resulting in a conversion rate of 84.35%.

Keyword: DoE, OpenFOAM, Eulerian, Lagrangian.

Sumário

Lista de Figuras	XI
Lista de Tabelas	XIII
Lista de Siglas e Símbolos	XIV
1 Introdução	1
1. Contextualização	1
2. Justificativa	5
3. Objetivos	6
3.1. Objetivos Específicos	6
2 Revisão Bibliográfica	7
1. Biomassa	7
2. Pirólise	9
2.1. Produtos da Pirólise	9
2.1.1. Produto Líquido	9
2.1.2. Produto Gasoso	10
2.1.3. Produto Sólido	11
2.2. Tipos de Pirólise	12
2.3. Reação da Pirólise	13
2.4. Tipos de Reatores	14
3. OpenFOAM	16
4. Modelagem de Escoamento Gás-Sólido	17
4.1. Características da Fase Discreta	18
4.1.1. Fração Volumétrica	18

4.1.2.	Tempos de Resposta	19
4.1.3.	Escoamento Diluído e Denso	19
4.1.4.	Acoplamento das Fases	21
4.2.	Abordagem de Resolução	23
4.2.1.	Abordagem Euleriana-Euleriana	23
4.2.2.	Abordagem Euler-Lagrange	24
5.	Modelo da Partícula Discreta	24
5.1.	Fase Gasosa	25
5.1.1.	Equação do Balanço de Massa	25
5.1.2.	Equação do Balanço de Quantidade de Movimento	26
5.1.3.	Equação do Balanço de Energia	26
5.1.4.	Equação do Balanço de Espécie Química	27
5.2.	Fase Sólida	28
5.2.1.	Equação de Movimento	28
5.2.2.	Equação de Energia	28
5.2.3.	Equação de Espécie Química	29
5.2.4.	Equação de Massa	29
5.3.	Modelos de Interação Gás-Sólido	29
5.3.1.	Interação de Massa	29
5.3.1.1	Reação Química	29
5.3.2.	Interação de Quantidade de Movimento	29
5.3.2.1	Força de Arraste	29
5.3.2.2	Força da Gravidade	30
5.3.3.	Interação de Energia	30
5.3.3.1	Convecção	30
5.3.3.2	Radiação	31
5.3.3.3	Entalpia de Reação	31
5.4.	Modelos de Colisões	32
5.4.1.	Modelo de Esfera Rígida	32
5.4.2.	Modelo de Esfera Macia	35
3	Metodologia	38
1.	Definição e Abordagem do Problema	38

2.	Domínio de Estudo	41
3.	Domínio Computacional	46
4.	Modelagem Matemática	47
4.1.	Equações Governantes	48
4.2.	Equações de Fechamento	50
4.3.	Cinética da Reação de Pirólise	50
4.3.1.	Mecanismo Semiglobal de Dois Estágios	51
4.3.2.	Mecanismo Multicomponentes e Multiestágios	52
5.	Propriedade dos Materiais	54
6.	Condições Iniciais e de Contorno	54
7.	Planejamento Experimental Numérico	62
8.	Modelagem Numérica	63
4	Resultados	65
1.	Validação dos Modelos	65
1.1.	Simulação com a Cinética Semiglobal de Dois Estágios	65
1.1.1.	Temperatura na Superfície da Partícula	66
1.1.2.	Massa da Partícula	68
1.1.3.	Dinâmica da Partícula	69
1.1.4.	Densidade da Partícula	71
1.1.5.	Rendimento Relativo da Reação de Pirólise	72
1.2.	Simulações com a Cinética Multicomponente e Multiestágio	74
1.2.1.	Celulose Pura	74
1.2.2.	Carvalho Vermelho	78
1.2.3.	Bagaço da Cana-de-Açúcar	83
1.3.	Simulação do Leito de Partículas Inerte	85
2.	Pirólise do Bagaço da Cana-de-Açúcar	87
2.1.	Comportamento do Leito	87
2.2.	Variação da Posição de Entrada da Biomassa	90
2.2.1.	Comportamento Dinâmico das Partículas	91
2.2.2.	Temperatura das Partículas	95
2.2.3.	Vapor de Bio-Óleo	97
2.2.4.	Biogás	98

2.2.5.	Conversão da Biomassa	99
2.3.	Planejamento Experimental Numérico	101
2.3.1.	Comportamento das Partículas Inertes	102
2.3.2.	Resultados do DoE Numérico	103
3.	Cenário Otimizado	109
3.1.	Conversão e Rendimento	109
3.2.	Produtos da Pirólise do Bagaço da Cana-de-Açúcar	111
3.3.	Temperatura	112
3.4.	Biocarvão	113
5	Conclusões e Recomendações	115
1.	Conclusões	115
2.	Recomendações para Trabalhos Futuros	117
	Raferências Bibliográficas	118

Lista de Figuras

1.1	Matriz energética brasileira em 2021.	3
2.1	Estruturas da celulose, hemicelulose e da lignina.	8
2.2	Regimes de Escoamento.	20
2.3	Acoplamento entre as fases.	21
2.4	Estratégias de acoplamento das fases.	22
2.5	Sistema de coordenadas utilizado na descrição dos modelos de colisão de partículas discretas.	33
3.1	Esquemático do equipamento estudado por Papadikis et al. (2009c).	41
3.2	Geometria adaptada do trabalho de Papadikis et al. (2009c) e utilizada na simulação 1.	42
3.3	Aparato experimental usado por Xue et al. (2012).	43
3.4	Geometria adaptada do trabalho de Xue et al. (2012) e utilizada nas simulações 2-4.	44
3.5	Aparato experimental e a geometria construída para a simulação 5.	45
3.6	Geometrias para diferentes posicionamentos de injeção das partículas de biomassa utilizadas nas simulações 6-16.	45
3.7	Malhas computacionais usadas para a) a simulação 1, b) para as simulações 2-4 e c) para as simulações 5-16.	47
3.8	Mecanismo de reação semiglobal de dois estágios.	51
3.9	Mecanismo de reação de vários componentes e vários estágios.	53
4.1	Comportamento da temperatura na superfície da partícula durante a pirólise.	67
4.2	Comportamento da massa da partícula durante a pirólise.	68

4.3	Dinâmica da partícula durante a pirólise do a) presente trabalho e b) Papadikis et al. (2009c).	70
4.4	Comportamento da densidade da partícula durante a pirólise.	71
4.5	Rendimento da a) biomassa, b) biocarvão, c) biogás e d) bio-óleo durante a pirólise.	72
4.6	Rendimento da pirólise da celulose pura.	75
4.7	Rendimento da pirólise da celulose pura ($\rho_g = 1,905$).	77
4.8	Rendimento da pirólise do carvalho vermelho.	80
4.9	Rendimento da pirólise do carvalho vermelho corrigido.	82
4.10	Rendimento da pirólise da cana-de-açúcar.	84
4.11	Comportamento das partículas inertes no leito de jorro.	86
4.12	Comportamento do leito de partículas inertes.	88
4.13	Velocidade das partículas inertes.	89
4.14	Comportamento das partículas de biomassa durante a pirólise para a geometria com entrada próximo a base do equipamento.	92
4.15	Comportamento das partículas de biomassa durante a pirólise para a geometria com entrada próximo ao meio do equipamento.	93
4.16	Comportamento das partículas de biomassa durante a pirólise para a geometria com entrada próximo ao topo do equipamento.	94
4.17	Temperatura das partículas.	96
4.18	Fração mássica do vapor de bio-óleo.	97
4.19	Fração mássica do biogás.	98
4.20	Comportamento das partículas inertes para os cenários do DoE.	102
4.21	Gráfico de Pareto para os efeitos analisados.	105
4.22	Gráfico dos efeitos principais.	106
4.23	Gráfico das interações dos efeitos.	107
4.24	Conversão do bagaço da cana-de-açúcar na pirólise em leito de jorro em função da temperatura e diâmetro da partícula.	108
4.25	Taxa de conversão da biomassa ao longo da simulação.	110
4.26	Rendimento da biomassa para a simulação de 10 segundos.	112
4.27	Temperatura das partículas para a simulação de 10 segundos.	113
4.28	Gráfico das interações dos efeitos.	114

Lista de Tabelas

2.1	Principais processos de pirólise.	13
3.1	Resumo das simulações realizadas.	40
3.2	Resumo das malhas utilizadas.	47
3.3	Equações governantes.	49
3.4	Equações de Fechamento.	50
3.5	Parâmetros de Arrhenius para a reação semiglobal de dois estágios.	52
3.6	Parâmetros de Arrhenius para o esquema multicomponente.	53
3.7	Propriedades dos materiais usados no desenvolvimento do trabalho.	54
3.8	Composição das biomassas estudadas.	57
3.9	Resumo das simulações do DoE numérico.	62
3.10	Métodos das discretizações.	63
3.11	Métodos da resolução dos sistemas de matrizes.	64
3.12	Parâmetros do acoplamento pressão-velocidade - PIMPLE.	64
4.1	Número de Biot para a simulação 1	66
4.2	Valores do rendimento da reação de pirólise com a cinética semiglobal de dois estágios.	73
4.3	Número de Biot para a simulação da celulose pura	74
4.4	Valores do rendimento da reação de pirólise para a celulose pura.	75
4.5	Tempo de residência da simulação 2 e do trabalho de Xue et al. (2012).	76
4.6	Número de Biot para a simulação com $\varrho_g = 1,905$	77
4.7	Rendimento da reação de pirólise para a celulose pura para o $\varrho = 1,905$ s.	78
4.8	Tempo de residência para a simulação do carvalho vermelho.	79
4.9	Número de Biot para a simulação do carvalho vermelho.	79
4.10	Rendimento da pirólise para o carvalho vermelho.	81

4.11	Valores da razão de formação de biocarvão.	81
4.12	Rendimento da pirólise para o carvalho vermelho depois do ajuste.	82
4.13	Tempo de residência para a simulação do bagaço da cana-de-açúcar.	83
4.14	Número de Biot para a simulação do cana-de-açúcar.	84
4.15	Rendimento da pirólise do bagaço da cana-de-açúcar.	85
4.16	Comparativo da conversão da biomassa após três segundos de simulação.	99
4.17	Comparativo do potencial de reação da biomassa dos cenários 6 -8.	101
4.18	Resultados do DoE numérico.	104
4.19	Conversão da biomassa para a simulação de 10 segundos.	109
4.20	Rendimento da biomassa para a simulação de 10 segundos.	111

Lista de Siglas e Símbolos

Siglas

ASMM Algebraic Slip Mixture Model

BFBR Bubbling Fluidized Bed Reactor

CAD Computer Aided Design

CFD Computational Fluid Dynamics

DEM Discrete Element Method

DES Detached Eddy Simulation

DNS Direct Numerical Simulation

DoE Design of Experiments

DPM Discrete Particle Model

DSMC Direct Simulation Monte Carlo

EPE Empresa de Pesquisa Energética

GPL General Public License

KTGF Kinetic Theory of Granular Flow

LES Large Eddy Simulation

MD Molecular Dynamics

MP – PIC Multiphase Particle In Cell

PIMPLE Pressure Implicit Method for Pressure-Linked Equations

RANS Reynolds Averaged Navier Stokes

SRS Scale-Resolving Simulation

TGA Thermogravimetric Analysis

VoF Volume of Fluid

Símbolos

α_g Fração volumétrica do gás [–]

α_p Fração volumétrica da partícula [–]

β_0 Coeficiente de restituição tangencial [–]

$\boldsymbol{\tau}_g$ Tensor tensão da fase gasosa [Pa/m^2]

χ_{gp} Taxa de reação da mudança de fase entre o gás e partícula [kg/m^3s]

χ_g^k Taxa de reação do componente k na fase gasosa [kg/m^3s]

$\chi_{i,k}^{g-p}$ Taxa de reação do componente k na partícula i [kg/s]

χ_i^{g-p} Taxa de reação da partícula i [kg/s]

Δ Comprimento característico turbulento [m]

δ_n Deslocamento normal [m]

δ_t Deslocamento tangencial [m]

ϵ_i Emissividade da partícula i [–]

η_n Coeficiente normal de amortecimento [kg/s]

η_t Coeficiente tangencial de amortecimento [kg/s]

Λ_c Razão de formação do biocarvão para a celulose [–]

Λ_h Razão de formação do biocarvão para a hemicelulose [–]

Λ_l Razão de formação do biocarvão para a lignina [–]

$\mu_{g,l}$ Viscosidade laminar da fase gasosa [Ns/m^2]

$\mu_{g,t}$	Viscosidade turbulenta da fase gasosa [Ns/m^2]
μ_g	Viscosidade da fase gasosa [Ns/m^2]
ν	Coefficiente de fricção dinâmico [N]
ω_i	Momento angular da partícula i [rad/s]
Ψ_i	Rendimento do componente i [%]
ψ_k	Constante de reação do componente k [s^{-1}]
$\psi_{p,i}^k$	Constante de reação do componente k par partícula i [s^{-1}]
ρ_g	Densidade do gás [kg/m^3]
ρ_p	Densidade da partícula [kg/m^3]
σ	Constante de Stefan-Boltzmann [W/m^2K^4]
τ_p	Tempo de resposta da quantidade de movimento para escoamento particulado [s]
τ_r	Tempo de resposta térmica para escoamento particulado [s]
\mathbf{F}_{gp}	Termo fonte para a troca de quantidade de movimento entre a fase gasosa e fase particulada [N/m^3]
\mathbf{f}_i^A	Força de arraste que atua na partícula i devido a interação com fluido [N]
\mathbf{f}_i^{g-p}	Forças que atuam na partícula i devido a interação com fluido [N]
\mathbf{f}_i^{gra}	Força gravitacional atuando na partícula i [N]
\mathbf{f}_i^{p-p}	Força adicionada na partícula i devido as colisões com outras partículas [N]
\mathbf{f}_i^{p-w}	Força adicionada na partícula i devido as colisões com a parede [N]
$\mathbf{f}_{t,i}$	Forças que atuam sobre a partícula i [N]
\mathbf{g}	Aceleração da gravidade [m/s^2]
\mathbf{J}	Vetor impulso [kgm/s]
\mathbf{J}_n	Componente normal do vetor impulso [kgm/s]

\mathbf{J}_t	Componente tangencial do vetor impulso [kgm/s]
$\mathbf{M}_{i,j}^{f-p}$	Torque adicionado na partícula i devido a interação com o fluido [Nm]
$\mathbf{M}_{i,j}^{p-p}$	Torque adicionado na partícula i devido as colisões partícula-partícula [Nm]
$\mathbf{M}_{i,j}^{p-w}$	Torque adicionado na partícula i devido as colisões partícula-parede [Nm]
\mathbf{n}_{ij}	Vetor unitário normal $[-]$
\mathbf{Q}_i^{g-p}	Calor fornecido ou recebido pela partícula i pela interação da fase gasosa com a fase particulada [J/s]
\mathbf{Q}_i^{p-p}	Calor fornecido ou recebido pela partícula i pelo contato com outras partículas [J/s]
\mathbf{Q}_i^{rad}	Calor fornecido ou recebido pela partícula i pelo mecanismo de reação [J/s]
$\mathbf{Q}_{r,i}^{p-p}$	Calor fornecido ou recebido pela partícula i devido a reação química [J/s]
\mathbf{r}_i	Vetor posição da partícula i [m]
\mathbf{t}_{ij}	Vetor unitário tangencia $[-]$
\mathbf{u}_g	Vetor velocidade do gás [m/s]
$\mathbf{u}_{p,i}$	Vetor velocidade do partícula i [m/s]
Θ_i	Fator pré-exponencial da reação i [s^{-1}]
Υ	Intensidade da turbulência [%]
ϱ_g	Tempo de residência da fase gasosa [s]
ς_F	Coefficiente de atrito [N]
ξ_n	Rigidez da mola normal [N/m]
ξ_t	Rigidez da mola tangencial [N/m]
$A_{p,i}$	Área da Partícula i [m^2]
C_D	Constante do modelo de Gidaspow $[-]$

C_o	Número de Courant $[-]$
c_{pg}	Capacidade calorífica do gás $[J/kgK]$
$c_{pp,i}$	Capacidade calorífica da partícula i $[J/kgK]$
D_c	Constante de arraste $[kg/m^3s]$
$D_{if,gl}^k$	Difusividade mássica laminar do componente k no meio $[m^2/s]$
$D_{if,gt}^k$	Difusividade mássica turbulenta do componente k no meio $[m^2/s]$
$D_{if,g}^k$	Difusividade mássica do componente k no meio $[m^2/s]$
$d_{p,i}$	Diâmetro da partícula i $[m]$
E_{ai}	Energia de ativação da reação i $[J/mol]$
E_{gp}^k	Taxa de reação do componente k devido a reação entre o gás e a partícula $[kg/m^3s]$
E_{gp}^k	Termo de interação do componente k presente na fase gasosa com a partícula $[N/m^3]$
e_n	Coefficiente de restituição normal $[-]$
f_C	Frequência de colisão $[s]$
$F_{ij,n}$	Força de contato normal entre as partículas $[N]$
$F_{ij,t}$	Força de contato tangencial entre as partículas $[N]$
F_{ij}	Força de contato entre as partículas $[N]$
H_{gp}	Troca de calor entre o gás e as partículas $[J/kg]$
I	Matriz identidade $[-]$
I_i	Momento de inercia da partícula i $[Nm]$
$k_{g,l}$	Condutividade térmica laminar da fase gasosa $[W/mK]$
$k_{g,t}$	Condutividade térmica turbulenta da fase gasosa $[W/mK]$
k_g	Condutividade térmica da fase gasosa $[W/mK]$

$L_{c,p}$	Comprimento característico da partícula [m]
M_i	Torque da partícula i [Nm]
m_i	Massa da partícula i [kg]
m_i^k	Massa do componente k da partícula i [kg]
n_p	Número de partículas $[-]$
Nu_p	Número de Nusselt para partícula $[-]$
p_g	Pressão da fase gasosa [Pa]
$Pr_{r,t}$	Número de Prandtl turbulento $[-]$
Q_{gp}	Transferência de calor entre a fase gasosa e a fase particulada [J/m^3s]
$Q_{r,gp}$	Calor gerado devido a reação entre a fase gasosa e a fase particulada [J/m^3s]
$Q_{r,g}$	Calor gerado devido a reação entre os componentes da fase gasosa [J/m^3s]
R_i	Raio da partícula i [m]
Re_p	Número de Reynolds para partícula $[-]$
$Sc_{c,t}$	Número de Schmidt turbulento $[-]$
T_g	Temperatura do gás [K]
$T_{p,i}$	Temperatura da partícula i [K]
$T_{sur,i}$	Temperatura do ambiente circundante [K]
$V_{elem,i}$	Volume do elemento i da malha [m^3]
$V_{p,i}$	Volume da partícula i [m^3]
V_{vc}	Volume do domínio de estudo [m^3]
$W_{p,i}$	Porção do volume da partícula ocupada na malha $[-]$
X	Conversão da reação [%]
Y_g^k	Fração mássica do componente k da fase gasosa $[-]$

$Y_{p,i}^c$ Fração mássica de celulose na biomassa [-]

$Y_{p,i}^h$ Fração mássica de hemicelulose na biomassa [-]

$Y_{p,i}^l$ Fração mássica de lignina na biomassa [-]

Capítulo 1

Introdução

1. CONTEXTUALIZAÇÃO

Nos últimos anos, tem-se acompanhado com uma maior frequência nos noticiários a ocorrência de eventos climáticos com graves consequências para a população humana e ecossistemas naturais, intensificando o debate sobre o aquecimento global, o que levaram os países a se comprometerem com uma agenda de combate às mudanças climáticas, no qual dentre os seus pilares estratégicos a longo prazo, está a busca da redução da emissão de gases causadores do efeito estufa.

O dióxido de carbono (CO_2) é o principal gás causador do efeito estufa. Ele é emitido na atmosfera pela queima dos combustíveis fósseis usados nas mais diversas atividades humanas. Portanto, minimizar essas emissões é de fundamental importância para frear o aquecimento do planeta. Uma forma que vem sendo usada é a substituição dos combustíveis fósseis por fontes de energias renováveis, uma vez que são alternativas atraentes que produzem significativamente menos poluentes tóxicos (Clissold et al., 2020).

A biomassa tem recebido grande atenção como uma fonte de energia renovável para a produção de bioenergia e biocombustíveis. Esse tema vem abordando várias questões energéticas e ambientais (Hameed et al., 2019). Diferente do que ocorre nos combustíveis fósseis, o desenvolvimento da biomassa não leva milhões de anos. Por exemplo, a biomassa vegetal é derivada do processo de fotossíntese, uma reação química entre o dióxido de carbono presente na atmosfera, a água presente no solo e a luz solar em um determinado comprimento de onda catalisada pela clorofila (McCree, 1971; Klass, 1998), que quebra as ligações do CO_2 e da água formando hidrocarbonetos ($C_mH_nO_p$) e libera oxigênio na

atmosfera. A biomassa animal, por sua vez, cresce se alimentando de fontes de biomassa. Em vista disso, ao contrário dos combustíveis fósseis, a biomassa pode ser produzida e por isso, ela é tida como uma fonte renovável, sendo esse o grande atrativo de usá-las como fonte de energia ou de produtos químicos (Basu, 2018).

Quando a biomassa é processada, ocorre a liberação de dióxido de carbono que as plantas absorveram da atmosfera. Esse CO_2 pode ser novamente recuperado de forma mais rápida, eficiente e sustentável através da sua absorção para a formação de novas biomassas, o que não ocorrem nos combustíveis fósseis, pois eles necessitam de condições geológicas, pressão e temperatura para sua formação (Demirbaş, 2001; Mohan et al., 2006). Assim, a queima de biomassa não faz nenhuma adição líquida aos níveis de dióxido de carbono do planeta. Por isso, desde que ocorra a reposição da biomassa, ela é considerada um fonte de energia “neutra em carbono” (Basu, 2018).

Segundo o relatório World Energy Resources (2016) elaborado pelo Conselho Mundial de Energia, a bioenergia, como é chamada a energia gerada a partir da biomassa, é atualmente a maior fonte renovável do mundo, respondendo por 14% das energias renováveis e por 2% da produção global. A Associação Mundial de Bioenergia estima que o uso da biomassa pode ser aumentado em até três vezes até 2035, quando as fontes renováveis poderiam atender mais de 50% da demanda mundial de energia.

Nas últimas duas décadas, o setor de bioenergia tem se desenvolvido no Brasil, chegando a ser responsável por cerca de 8,2% da oferta interna de eletricidade em 2021 (EPE, 2022), como mostrado na Figura 1.1.

O Brasil ainda segue com um grande potencial de crescimento no setor de bioenergia, pois possui algumas vantagens comparativas em relação aos outros países, entre as quais podemos citar: condições climáticas favoráveis, disponibilidade de água e possibilidade de expansão de áreas com plantios energéticos sem competição com a agricultura de alimentos. Essas vantagens, somadas aos aperfeiçoamentos tecnológicos em diversas rotas de conversão de biomassa para energia, além do aperfeiçoamento de novas fontes de biomassa e das tradicionais, projetam um cenário de potencial redução de custos e expansão da produção de bioenergia no país (Ruiz, 2015).

Existem uma série de processos para converter a biomassa em biocombustíveis. Dentre as principais se destaca a pirólise, que tem sido uma das mais favoráveis para a produção de bio-óleo, ao produzir como subproduto uma fase gasosa (biogás) e uma fase

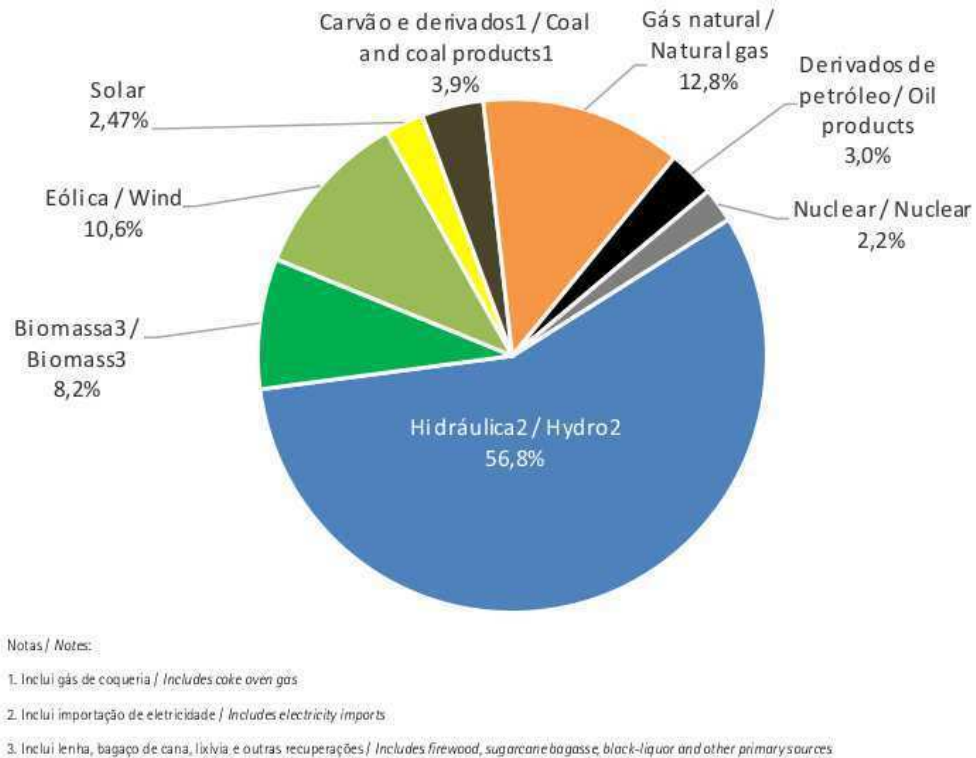


Figura 1.1 – Matriz energética brasileira em 2021.

Fonte: EPE (2022)

sólida (bio-carvão) (Clissold et al., 2020; Toscano Miranda et al., 2021). Neste processo, a biomassa é degradada termicamente em uma atmosfera inerte (na ausência de oxigênio) e em temperaturas moderadas. Essa decomposição pode durar alguns segundos ou até algumas horas (Clissold et al., 2020).

A pirólise da biomassa sempre é realizada em reatores e ao longo do tempo, uma variedade desses equipamentos foram projetados para otimizar a geração de bio-óleo (Jalilifar et al., 2018; Cardoso et al., 2018). Entre eles, podemos citar o reator de leito fluidizado borbulhante (BFBR), leito fluidizado circulante e reatores de Auger (von Berg et al., 2020; Campuzano et al., 2019). Dentre os citados, o BFBR destaca-se por causa de suas aplicações diretas, excelente mistura de sólidos, alto desempenho de transferência de calor e ampla flexibilidade de combustível (Dong et al., 2017).

Existem uma vasta quantidade de estudos experimentais sobre a pirólise da biomassa (Yang et al., 2021b). Mesmo que os experimentos ajudem na otimização do processo de pirólise, Duarte et al. (2015) afirmam que os estudos que aplicam técnicas experimentais apresentam alguns obstáculos, como por exemplo: o custo para construção de equipamentos, perturbações provocadas por medidas experimentais intrusivas, entre

outras. Dessa forma, a aplicação de simulação numérica computacional pode contribuir com o entendimento profundo das complexas físicas e termoquímicas da pirólise, ajudando no desenvolvimento e otimização do equipamento.

A maior parte dos trabalhos em CFD reportados na literatura são aplicações da pirólise de biomassa em reatores de leito fluidizado (Hooshdaran et al., 2021). Nos trabalhos realizados por Papadikis et al. (2009a,b,c) e Papadikis et al. (2010a,b) foram simulados em leito fluidizado o efeito da esfericidade, o arraste e a influência do tamanho da partícula na transferência de calor, de quantidade de movimento, de massa e de espécie química. Hu et al. (2019a) modelaram a reação de pirólise rápida utilizando CFD-DEM para investigar os efeitos do encolhimento e da velocidade superficial do gás.

Já Park and Choi (2019a) analisaram a influência da temperatura de reação e da velocidade do gás na hidrodinâmica, na transferência de calor e na reação de pirólise. Yang et al. (2021b) modelaram um reator tridimensional de leito fluidizado borbulhante (BFB) para a pirólise rápida usando o método MP-PIC da abordagem Euler-Lagrange com o objetivo de estudar a dinâmica física e térmica das bolhas sob a condição de alta temperatura.

Entre os estudos sobre a pirólise de biomassa em leito de jorro, os que usaram CFD focaram principalmente nas características hidrodinâmicas do reator. No entanto que Park and Choi (2019b) afirmam que a simulação CFD da pirólise rápida de biomassa no reator de leito de jorro têm sido muito rara de se encontrar.

Hooshdaran et al. (2021) propuseram um modelo para prever a evolução dos produtos da pirólise de biomassa, em que foi avaliado o efeito do tubo draft em um reator de leito de jorro cônico 2D utilizando o modelo KTGF. Yang et al. (2021b) estudaram as características físicas e termoquímicas da pirólise de biomassa de um reator de leito de jorro em escala de laboratório por meio da modelagem MP-PIC. Park and Choi (2019b) analisaram o efeito da temperatura de reação e da velocidade do gás sobre a hidrodinâmica, transferência de calor e o efeito sobre a reação de pirólise em um reator de leito de jorro cônico 3D utilizando a técnica do MP-PIC da abordagem Euleriana-Lagrangeana.

Diante do exposto, a proposta desse trabalho é estudar os fenômenos físicos presentes na pirólise do bagaço da cana-de-açúcar em diferentes configurações geométricas e operacionais utilizando uma abordagem CFD Euleriana-Lagrangiana. Os modelos serão implementados e simulados no OpenFOAM e após sua validação, serão avaliados diferentes

posicionamentos para a injeção de biomassa e a influência da velocidade e da temperatura do gás, além do diâmetro das partículas da biomassa sobre as reações de pirólise, a fim de encontrar parâmetros que otimizem o processo.

2. JUSTIFICATIVA

A biomassa é conhecida como a fonte mais abundante de energia renovável, uma vez que está disponível em todos os países, em várias formas, e pode ser convertida em formas úteis de energia usando diferentes técnicas de conversão. No Brasil, o bagaço da cana-de-açúcar é uma alternativa importante de biomassa, visto que o país é o maior produtor de cana-de-açúcar do mundo, produzindo cerca de 572,9 milhões de toneladas em 2021 (CONAB, 2022).

Dentre os reatores de pirólise estudados, o leito de jorro se caracteriza pela movimentação das partículas, ao apresentar movimentos cíclicos e mais uniformes comparados com o leito fluidizado, possibilitando, um contato mais efetivo entre as fases envolvidas e por isso, alcança elevados coeficientes convectivos de transferência de massa e energia. Dessa forma, o leito de jorro apresenta uma maior eficiência em suas operações quando comparado com outros equipamentos, além de apresentar baixo custo de instalação, operação e manutenção.

Nos últimos anos, têm-se estudado os parâmetros operacionais da pirólise que afetam a quantidade de formação de bio-óleo para diferentes tipos de biomassa (Jalalifar et al., 2018; Xiong et al., 2013a), bem como a melhor configuração do reator. Nesse sentido, o desenvolvimento de modelos computacionais contribuem na otimização e desenvolvimento de novos reatores de pirólise, pois permitem simular o processo, de modo a analisar e encontrar os melhores parâmetros e configurações geométricas dos equipamentos.

As principais vantagens do estudo da pirólise em leito de jorro por CFD (Computational Fluid Dynamics) estão relacionadas ao fato de que ela permite investigar o escoamento dos fluidos dentro do equipamento, assim como a transferência de calor e de massa entre as fases presentes, permitindo ser proposto otimizações operacionais e geométricas sem as desvantagens de custo e tempo relacionadas à realização de experimentos laboratoriais.

3. OBJETIVOS

Estudar a pirólise do bagaço da cana-de-açúcar em leito de jorro via fluidodinâmica computacional, com ênfase na dinâmica e nas transferências de calor e massa envolvidas no processo.

3.1. Objetivos Específicos

- Definir, implementar e simular os modelos matemáticos que descrevam adequadamente o comportamento da pirólise em um leito de jorro, validando os resultados obtidos com dados experimentais e/ou com dados reportados na literatura.
- Analisar o comportamento da pirólise a partir de diferentes posições de entrada da biomassa no leito de jorro.
- Investigar o efeito da velocidade e da temperatura do gás, bem como o diâmetro das partículas de biomassa sobre a reação de pirólise.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

1. BIOMASSA

Biomassa pode ser definido como qualquer material orgânico não fóssil e biodegradável de origem vegetal ou animal que seja utilizado para a geração de energia, isso inclui lenha, bagaço de cana-de-açúcar, lixo orgânico, entre outros (Orellana, 2019; Miranda, 2017).

Em termos químicos, a biomassa vegetal constitui-se principalmente de lignocelulose, que por sua vez, é constituído por três diferentes tipos de polímero, sendo eles a celulose, que corresponde cerca de 40–60% em peso, a hemicelulose, que varia de 15–30% também em peso e a lignina, que apresenta um intervalo de 10–25% (Rowell, 2012; Foong et al., 2020). Além desses três componentes, também existem uma certa quantidade de cinzas e extrativos, este último são componentes que não fazem parte da constituição química da parede celular e inclui elevado número de compostos, como resinas, açúcares, taninos, ácidos graxos, dentre outros, que podem ser extraídos em água ou solventes orgânicos (Silvério et al., 2006). As composições de cada componente são dependentes da fonte de biomassa.

Os componentes lignocelulósicos são compostos principalmente pelos elementos C, H e O, contendo um teor total superior a 95%. A celulose é o principal componente das paredes celulares dos vegetais, sendo composta por D-glicose através da polimerização de ligações glicosídicas que formam um polímero linear (Peng et al., 2012). A hemicelulose é o segundo componente mais abundante da biomassa vegetal, estando presente junto com a celulose em quase todas as paredes celulares das plantas. É composto de monômeros

de açúcar C_5 e C_6 , incluindo glicose, galactose, manose, xilose e arabinose (Lujiang et al., 2020). A lignina é um polímero tridimensional complexo de grupos propil-fenol unidos por $C - O$ e $C - C$. A lignina forma uma estrutura “lignocelulósica” para fornecer um escudo natural contra a rápida destruição microbiana ou fúngica das fibras celulósicas (Lujiang et al., 2020). Na Figura 2.1, pode ser observado as estruturas de monômero de celulose, hemicelulose e lignina.

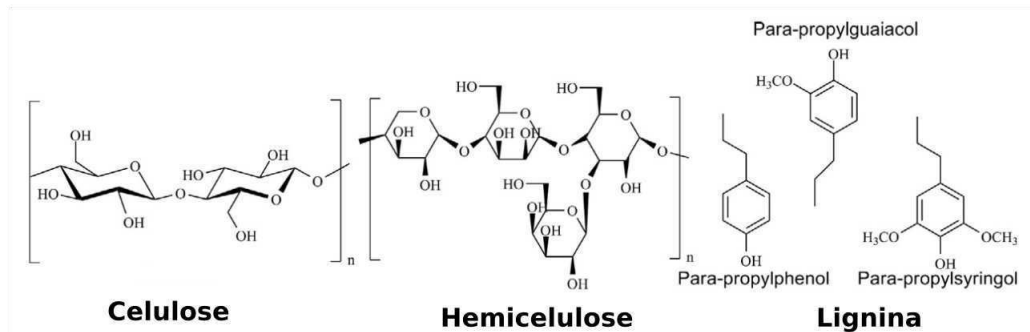


Figura 2.1 – Estruturas da celulose, hemicelulose e da lignina.

Fonte: Foong et al. (2020)

A combustão da biomassa é uma fonte de energia importante desde o descobrimento do fogo, tendo um papel significativo até a segunda revolução industrial, quando surgiram fontes alternativas de energia, de forma a acompanhar o desenvolvimento e a demanda por produtos industrializados (Orellana, 2019).

A escolha da biomassa para geração de energia deve passar por alguns critérios como: apresentar alto rendimento de plantio, baixo consumo de energia e custo para a produção, composição com baixa contaminação e baixa necessidade de nutrientes durante o período de crescimento. Também deve ser levado em consideração as características que envolvem o clima do local de cultivo e as condições do solo, consumo de água e resistências a pragas evitando a necessidade de fertilizantes e herbicidas (Cunha, 2017).

No Brasil, a geração de energia elétrica a partir da biomassa ocorre principalmente nos setores sucroalcooleiro, de papel e celulose, arrozeiro e nas agroindústrias pelos seus resíduos correspondentes. Para aumentar a participação da biomassa na geração de energia no Brasil a partir dos demais seguimentos industriais, necessita-se de estudos do potencial e disponibilidade uma vez que a aplicação de resíduos como combustíveis em alguns setores não é algo tradicional (Marafon et al., 2016).

Segundo Freitas (2016), os tipos de biomassa utilizados no Brasil são: a lenha,

carvão vegetal, resíduos de madeira, lixívia negra (biomassa de origem florestal), palha e bagaço da cana-de-açúcar, palha e casca de arroz, capim-elefante, palha do milho, palha da soja (biomassa derivada de cultura agrícola), lixos líquidos e sólidos (rejeitos urbanos e industriais). Dentre esses, segundo a Marafon et al. (2016), o bagaço da cana-de-açúcar é a biomassa mais utilizada para geração de energia no país, correspondendo 78,2 % do total de biomassa utilizada.

2. PIRÓLISE

A pirólise pode ser definida como um processo de decomposição térmica de componentes orgânicos em uma atmosfera sem a presença do oxigênio, ou com uma concentração extremamente baixa que não possibilite a ocorrência de combustão (Miranda, 2017; Schena, 2019). Durante a pirólise, grandes e complexas moléculas de hidrocarbonetos se decompõem em moléculas relativamente menores e mais simples de gás, líquido e sólido, formando assim, os produtos da pirólise.

A pirólise ocorre em duas etapas principais. Os produtos primários da degradação das partículas de biomassa são geralmente chamados de condensáveis (vapor de bio-óleo), voláteis não condensáveis (biogás) e carvão (bio-carvão). Os condensáveis também é denominado como bio-óleo, pois serão condensados ao longo do processo, sendo sua composição formada por compostos orgânicos de grandes cadeias. Os voláteis também são chamados de biogás, e sua composição é formado principalmente de CO , CO_2 , H_2 e hidrocarbonetos $C_1 - C_3$. Reações secundárias do alcatrão produzido resultam na formação de produtos de degradação secundária e, geralmente, rendimentos orgânicos reduzidos (Vikram et al., 2021; Sobek and Werle, 2019; Sharma et al., 2015).

2.1. Produtos da Pirólise

2.1.1. Produto Líquido

A fase líquida é uma mistura complexa de compostos orgânicos com moléculas de vários tamanhos obtidos das reações de despolimerização e fragmentação da celulose, hemicelulose e lignina e que é composta predominantemente por fenóis, álcoois, aldeídos, cetonas e ácidos dicarboxílicos, entre outros (Schena, 2019; Ferreira, 2020). O produto líquido é conhecido como bio-óleo, mas também é chamado de óleo de pirólise, alcatrão

de pirólise, líquido de madeira, entre outros nomes (Kan et al., 2016).

O bio-óleo é gerado através da condensação rápida dos componentes voláteis liberados durante o processo de pirólise. Segundo Gonçalves (2016), as características químicas e físicas do bio-óleo estão ligadas a algumas variáveis de processo, tais como a umidade da biomassa, o tamanho das partículas, a configuração do reator, a taxa de aquecimento, a temperatura de reação e o tempo de residência do vapor formado.

O bio-óleo apresenta diversas aplicações que podem ser exploradas de inúmeras formas. Segundo Kan et al. (2016), esse composto foi amplamente testado como combustível em processos de combustão, geração de eletricidade e produção de calor processos industriais. Porém, apesar do bio-óleo ser menos poluente em relação aos combustíveis fósseis, o mesmo apresenta alta viscosidade, acidez elevada, caráter corrosivo e alto teor de oxigênio, o que diminui a capacidade calorífica, limitando a sua aplicação direta como combustível líquido. Schwieder (2012) afirma que na área de geração de energia, o bio-óleo vem sendo aplicado tanto em fornalhas e boilers para fornecimento de calor quanto em motores a diesel, do tipo Stirling. Geralmente, o poder calorífico dos bio-óleos varia entre 15 a 20 MJ/kg, representando 40-50% da energia liberada pelo diesel fóssil (42-45MJ/kg) (Demirbas, 2007; Jesus, 2017).

Segundo Lazzari (2014), o bio-óleo também pode ser utilizado como uma rica fonte de inúmeros componentes químicos que apresentam capacidade de serem usados nos mais diversos seguimentos industriais, possuindo um alto valor agregado. Essa obtenção depende de processos de extração e isolamento desses insumos químicos. Bridgwater et al. (1999) afirmam que podem ser extraídos do bio-óleo componentes como polifenóis para uso em resinas com formaldeído, levoglucosano que pode gerar glicose por meio da hidrólise, e hidroxiacetaldeído essências para a indústria de alimentos.

2.1.2. Produto Gasoso

A fase gasosa também chamada de gás não condensável, pois trata-se dos gases não recuperados como bio-óleo, é em geral composta por CO , CO_2 , H_2 e hidrocarbonetos de baixo peso molecular (CH_4 , C_2H_6 , C_2H_4 , C_3H_8) e NH_3 (Chagas, 2016). Esses produtos podem ser usados em diversas aplicações, gerando ainda mais valor agregado ao processo de pirólise.

Segundo Chagas (2016), o gás gerado na pirólise pode substituir o gás natural ou

o gás utilizado em motores de ignição comandada. Além disso, esses gases podem ser utilizados como fonte de geração de energia para a própria planta de pirólise (Sharuddin et al., 2016). O gás de síntese (CO e H_2) pode ser utilizado em aplicações envolvendo combustíveis de transporte e produção de químicos (Moghadam et al., 2014).

Além de resultar em bio-óleo e biocarvão, a pirólise tem se tornado uma alternativa viável para a produção de misturas ricas em H_2 , que pode ser aplicadas a processos de hidrotratamento, produção de amônia e aplicação em células a combustível.

2.1.3. Produto Sólido

O componente sólido da pirólise é o biocarvão, ou carvão vegetal. É um sólido que segundo Tripathi et al. (2016) é poroso e rico em carbono, que pode ser usado principalmente como combustível, adsorvente e em tratamento do solo.

O biocarvão é capaz de melhorar propriedades de fertilização e remediação de contaminantes quando utilizado no solo (Malghani et al., 2013). Tal aplicação se deve pelo biocarvão ser um bom adsorvente, ele é capaz de sequestrar grande quantidade de carbono (o que ameniza o efeito estufa), retém a água, nutrientes e agentes químicos, o que acaba evitando a contaminação das águas subterrâneas e o fenômeno de erosão do solo (Mullen et al., 2010).

Segundo Laird et al. (2009), uma vez que o biocarvão apresenta baixos teores de enxofre e teor energético de aproximadamente de 18 MJ/kg, ele pode ser usado como combustível sólido em algumas atividades industriais, o que não necessitaria de tecnologia para remoção de SO_x .

O biocarvão também pode ser utilizado como carvão ativado, sendo esta aplicação considerada o material de maior valor agregado advindo da pirólise convencional da biomassa. Quando comparado com versões comerciais disponíveis, o carvão ativado da pirólise é mais economicamente atrativo e mais ambientalmente favorável (Gonçalves, 2016). Ele oferece diversas aplicações na área de tratamento de água residuária e em tratamento de efluentes industriais, também pode ser utilizado na adsorção de gases e como catalisador nas indústrias alimentícias (Kan et al., 2016).

2.2. Tipos de Pirólise

Em qualquer processos de pirólise o comportamento será sempre o mesmo, a biomassa é aquecida em uma atmosfera inerte, com isso grandes e complexas cadeias de hidrocarbonetos irão se decompor em moléculas menores e mais simples, gerando assim seus produtos. As variáveis que mudam de um processo de pirólise para outro é a taxa de aquecimento da biomassa, através do tipo de biomassa e temperatura usada e o tempo em que a biomassa permanece no reator, manipulada através da vazão de gás inerte e do tamanho das partículas. Com base na taxa de aquecimento, Benevides (2015) afirma que podemos classificar a pirólise em: lenta (ou carbonização), rápida e flash.

A pirólise lenta é caracterizada por apresentar tempos de residência longos, taxas de aquecimento da biomassa em torno de 2 °C/s e temperaturas de operação mais baixas (menores que 500 °C) quando compara a pirólise rápida. Nesse processo a formação do biocarvão é favorecida, tornando-se o produto principal da reação (Bridgwater, 2012; Brownsort, 2009; Batista Junior, 2017).

Já a pirólise rápida ocorre a temperaturas elevadas (em torno de 500 °C), com uma taxa de aquecimento na faixa de 10 a 100 °C/s e tempos de residência bastante curto, entre 0,5 e 5s (Batista Junior, 2017). Segundo Bridgwater (2012), o produto principal nesse tipo de pirólise é o bio-óleo, cujo rendimento nessa reação é em torno de 50-75% dependendo da composição da biomassa. Porém se aumentarmos o tempo de residência do bio-óleo no reator, podemos favorecer a formação dos gases não condensáveis a partir de reações secundárias.

Ainda segundo Batista Junior (2017), as condições essenciais para otimizar a produção de bio-óleo a partir da pirólise rápida são:

- Biomassa com baixa umidade, recomenda-se menor que 10%.
- Biomassa triturada em partículas finas, preferencialmente menores que 3mm, pois facilita a transferência de calor em seu interior, uma vez que biomassa é um material que apresenta baixas condutividades.
- Altas taxas de aquecimento e transferência de calor.
- Baixo tempo de residência da fase vapor, preferencialmente menor que 2s, com o objetivo de minimizar as reações secundárias.
- Rápida remoção do carvão produzido, uma vez que o mesmo pode realizar um

craqueamento dos vapores da pirólise.

- Rápido resfriamento dos vapores da pirólise para formar o bio-óleo.

Para as pirólises que ocorrem muito rápida, alguns autores chamam esse processo de “pirólise flash”. Esse tipo de pirólise trabalha com temperaturas acima de 500 °C, com taxas de aquecimento bastante elevadas (acima 100 °C/s) e apresentam tempo de residência menores que 1s através do uso de partículas muito pequenas (Batista Junior, 2017; Marcilla et al., 2013).

Na Tabela 2.1 encontra-se um resumo dos principais processos de pirólise.

Tabela 2.1 – Principais processos de pirólise.

Pirólise	Tempo de Residência	Taxa de Aquecimento	Temperatura	Produtos
Lenta	Dias	Baixo	~ 400 °C	Carvão Vegetal
Rápida	<5s	Alto	~ 500 °C	Bio-óleo
Flash	<1s	Muito Alto	> 550 °C	Bio-óleo

Fonte: Adaptado de Basu (2018).

2.3. Reação da Pirólise

De acordo com Mazlan et al. (2015), existem quatro etapas no processo de pirólise. A primeira etapa é a remoção da umidade, seguida da decomposição da hemicelulose, da celulose e da lignina. A primeira etapa ocorre em baixas temperatura e sozinha, enquanto que as outras três etapas ocorrem de forma simultânea.

Como o próprio nome já diz, a etapa de remoção da umidade é o momento em que ocorre a retirada da umidade das amostras de biomassa pelo processo de aquecimento a uma temperatura de 105 °C. A umidade livre evapora e o calor é então conduzido para o interior da biomassa.

A etapa da decomposição da celulose é um processo complexo e com várias reações. A primeira reação forma um produto intermediário de vida curta chamada de celulose ativa. Após essa reação intermediária, ocorrem duas reações competitivas. Uma das reações envolve a desidratação, descarboxilação e carbonização através de uma sequência de etapas para produzir o biocarvão e os gases não condensáveis. A outra reação envolve

a despolimerização e cisão, formando gases condensáveis. Se o vapor condensável for retirado rapidamente do reator, pode-se condensá-lo como bio-óleo, caso contrário, ele pode sofrer reações secundárias, sofrendo craqueamento em biocarvão ou gás não condensável (Basu, 2018).

As etapas de decomposição da hemicelulose e da lignina são semelhantes a decomposição da celulose. Na decomposição, a hemicelulose produz não apenas mais gases não condensáveis e menos gases condensáveis, mas também menos biocarvão em comparação a celulose. A reação de decomposição da hemicelulose se inicia a um temperatura menor do que a celulose ou da lignina, em uma faixa de 250 - 350 °C. Na decomposição da lignina, o principal produto formado é o biocarvão, respondendo por mais da metade dos produtos gerados, seguido de gases condensáveis e depois por gases não-condensáveis. A decomposição da lignina começa a uma temperatura de aproximadamente de 280 °C (Basu, 2018).

2.4. Tipos de Reatores

Segundo Ribeiro (2015), a etapa principal do processo de pirólise é o reator. Eles têm sido objeto de investigação, inovação e desenvolvimento para a otimização das características essenciais do processo, como altas taxas de aquecimento, temperaturas moderadas e tempos curtos de residência do vapor, buscando sempre maximizar o produto de interesse.

Com o contínuo avanço das tecnologias de pirólise, diversos tipos de reatores foram sendo desenvolvidos ao longo do tempo, Ribeiro (2015) cita os seguintes reatores como os mais populares:

- Reator em Leito Fixo - Nesse tipo de reator, um fluido é passado através de um material sólido granulado em baixas velocidades, os sólidos permanecem fixo no local enquanto o fluido passa através dos espaços vazios do leito. Geralmente esse reator opera com a quantidade de carbono elevado, longo tempo de residência para a fase sólida, baixa velocidade de gás e baixo teor de cinzas. Esse tipo de reator é usado para geração de calor e energia em pequena escala, tendo como seu principal problema a remoção do alcatrão, o que abriu a possibilidade para o uso da conversão térmica e catalítica para a sua retirada (Lv et al., 2004; Moreira, 2015).

- Reator em Leito Fluidizado - Semelhante ao reator de leito fixo, os reatores em leito fluidizado passa um fluido através de um material sólido granulado, porém em altas velocidades, fazendo com que o material sólido seja suspenso e se comporte como se fosse um fluido. Geralmente esse tipo de reator é aplicado para uma pirólise do tipo rápida, uma vez que ele proporciona uma rápida transferência de calor, um bom controle da reação de pirólise e do tempo de residência do vapor, alta área de contanto superficial entre o fluido e o sólido, bom transporte térmico no interior do sistema e alta velocidade relativa entre a fase sólida e a fase fluida (Jahirul et al., 2012; Moreira, 2015).

- Reator Ablativo - Na pirólise ablativa, o calor é transferido da parede quente do reator para a biomassa que está em contacto com ela sob pressão. À medida que a biomassa é aproximada do disco, a camada fundida vaporiza, resultando num produto muito semelhante ao formado nos sistemas de leito fluidizado. A película de óleo residual proporciona lubrificação para partículas sucessivas de biomassa e também é evaporada rapidamente dando origem a vapores de pirólise que são recolhidos da mesma forma que em outros processos (Bridgwater, 2012). As principais características de um reator de pirólise ablativa são o alto movimento relativo entre a partícula e a parede do reator, temperatura da parede do reator inferior a 600 °C (Basu, 2018).

- Reator Rotativo - A biomassa é alimentada na região do fundo de um cone rotativo (360-960 rotações/minuto) juntamente com um excesso de partículas inertes usada para transferência de calor. A força centrífuga empurra as partículas contra a parede quente, estas são transportadas em espiral para cima ao longo da parede. O gás, que contém o vapor do bio-óleo, sai através de um outro tubo, enquanto que o carbonizado sólido e a areia derramam sobre a borda superior do cone caindo num leito fluidizado (Bridgwater, 2012). As características deste reator incluem um tempo de residência dos sólidos muito curto e um pequeno tempo de residência da fase gasosa (Basu, 2018).

- Reator em Leito de Jorro - A entrada do ar em um único orifício permite que o ar de jorro penetre por toda a extensão da câmara permitindo que sua operação seja feita em leitos de grandes dimensões sem a ocorrência de elevadas perdas de carga. Nesse tipo de reator existe um vigoroso contato gás-sólido, o que aumenta a transferência de calor e massa entre as fases, aumenta a taxa de aquecimento do sólido e evita a desfluidificação do leito por aglomeração de partículas. Além disso, a operação pode ser realizada com tempos de residência de gás curtos. Conseqüentemente, as reações secundárias dos voláteis

formados no reator são reduzidas (Amutio et al., 2012; Fernandez-Akarregi et al., 2013).

3. OPENFOAM

Com o objetivo de desenvolver um código CFD e estruturá-lo de forma a se tornar geral o suficiente para que outras pessoas pudessem utilizá-lo como um *software* confiável, eficiente e de fácil manuseio, em 1993, os então alunos de doutorado da Imperial College, Henry Weller e Hrvoje Jasak combinaram esforços e desenvolveram a ferramenta FOAM (Field Operation and Manipulation) para operar e manipular campos tensoriais visando aplicações na fluidodinâmica computacional.

Em dezembro de 2004, o FOAM teve seu código liberado e se tornou domínio público através da licença GPL (Gnu Public License), assim tendo seu nome mudado para OpenFOAM (Open Field Operation and Manipulation). A partir deste momento houve um enorme crescimento no número de usuários que, além de poder usar os muitos *solvers* padrões que o pacote já possuía para o caso dos problemas mais gerais envolvendo fluidos newtonianos, podiam também desenvolver *solvers* específicos para os seus problemas de interesse.

A tecnologia do OpenFOAM é baseada em um conjunto eficiente e flexível de módulos escritos em C++ que são usados com o intuito de construir: (i) *solvers* para resolver problemas específicos de engenharia que envolvam campos vetoriais, (ii) utilitários para realizar tarefas de pré e pós-processamento, que vão de uma simples manipulação de dados à visualização e construção e processamento de malhas, e (iii) bibliotecas de expansão usadas pelos *solvers* e utilitários, tal como uma biblioteca de modelos físicos.

O OpenFOAM é um pacote completo no sentido de permitir a simulação de sistemas complexos utilizando computação em paralelo, permite a utilização de malhas estruturadas e não-estruturadas, assim como permite a importação das mesmas de *softwares* livres e comerciais. Possui uma grande capacidade multi-física, apresentando fluxos compressíveis e incompressíveis, transferência de calor, combustão, reação química, fluxos multifásicos, transferência de massa; métodos de partículas (DEM, DSMC, MD), rastreamento de partículas lagrangianas; análise de tensão e interação fluido-estrutura, manipulação de malhas dinâmica e refinamento adaptativo. Quanto à modelagem física apresenta modelos termo-físicos e propriedades físicas para líquidos e gases; modelos de transporte/reologia; modelos de viscosidade newtoniana e não-newtoniana; extensas ca-

pacidades de modelagem de turbulência (RANS, SRS, DES, LES e DNS); modelagem discreta de partículas (DPM, MP-PIC); métodos VOF e EULER-EULER para fluxos multifásicos; modelagem de transferência de momento interfásico para fluxos multifásicos; velocidade da chama; reação química; meios porosos e alguns outros. Além de possuir uma grande variedade de esquemas de interpolação e bons *solvers* para resolução de sistemas lineares de equações.

4. MODELAGEM DE ESCOAMENTO GÁS-SÓLIDO

Na fluidodinâmica, os estudos envolvendo escoamentos multifásicos podem ser definidos para qualquer sistema de escoamento de fluido em que haja duas ou mais fases distintas presente simultaneamente, apresentando algum nível de separação entre as fases em um nível acima do escala molecular (Yeoh and Tu, 2019).

Escoamentos multifásicos apresentam uma certa complexidade em sua modelagem devido a existência de interfaces que separam as diferentes fases. Essas interfaces podem ser múltiplas, deformáveis e móveis, o que origina uma descontinuidade nos valores das propriedades físicas dos fluido, causando um escoamento bastante complexo em suas vizinhanças. Neste sentido, um escoamento multifásico pode ser classificado como gás-sólido, gás-líquido, líquido-líquido (Ishii and Hibiki, 2011).

O escoamento gás-sólido, também tratado como gás-partícula, são referente a movimentação de partículas sólidas suspensas na fase gasosa. Existem uma vasta quantidade de problemas em que esse tipo de escoamento pode ser aplicado, indo de estudo envolvendo o meio ambiente até com o desenvolvimento de novas tecnologias industriais.

Em aplicações que envolvem o meio ambiente, encontra-se estudos de problemas ambientais envolvendo partículas associados a poluição da atmosfera e da hidrosfera. Como por exemplo a análise do efeito de altas concentrações de rejeitos sólidos dispersos em efluentes, prever a dispersão de poluentes, fornecendo os meios necessários para entender os fenômenos de fluxo natural de dispersão poluentes de partículas e fornecendo soluções efetivas para reduzir as altas concentrações a níveis aceitáveis. Uma outra aplicação que vem sendo estudada com essa abordagem é o efeito de um ataque químicos e biológico com o uso de aerossóis e gotículas como partículas migratórias no ar; esse incidente trágico, tem várias consequências desastrosas que afetam a população humana e o meio ambiente. (Crowe et al., 2012)

As aplicações do escoamento gás-partícula para fins tecnológicos envolvem uma ampla aplicabilidade de situações e dizem respeito ao projeto e controle de vários processos multifásicos. Segundo Yeoh and Tu (2019), existe uma crescente demanda para resolver os diferentes tipos de escoamento gás-partícula através da aplicação de modelos de escoamento multifásico, no qual pode-se citar sistemas de controle de poeiras e controle de poluentes de partículas e gases de escape, combustão em fornos e motores diesel envolvendo mistura de reagentes de partículas sólidas ou aerossóis e ar, separação de partículas de efluentes e de secagem; Estudos de leitos fluidizados que também estão conectados com sistemas de conversão de energia geralmente envolvem muitos processos químicos, incluindo a gaseificação, combustão e liquefação do carvão; o estudo da remoção de partículas de efluentes industriais usando um projeto de ciclone; essa abordagem também pode ser aplicada a sistemas de secador de sementes, como o leito de jorro entre outras aplicações.

4.1. Características da Fase Discreta

4.1.1. Fração Volumétrica

O mecanismo de escoamento gás-sólido depende significativamente da média das distancias entre as partículas. Esta informação é importante para determinar se a partícula pode ser tratada como um elemento isolado. A fração volumétrica das partículas pode ser calculada como:

$$\alpha_p = \frac{n_p V_{p,i}}{V_{VC}} \quad (2.1)$$

onde n é o número de partículas, $V_{p,i}$ é o volume das partículas e V_{VC} é o volume do domínio de estudo. Para uma fração volumétrica de 10%, as partículas estão muito próximas para serem tratadas como isoladas, portanto a transferência de massa, de quantidade de movimento e de calor de uma partícula, afeta diretamente a sua vizinha. Para o caso em que as partículas possam ser tratadas como isoladas, uma partícula não terá influência sobre sua vizinha, isso ocorre para frações volumétricas inferiores a 0,1% (Crowe et al., 2012).

4.1.2. Tempos de Resposta

O tempo de resposta para uma partícula mudar sua velocidade ou sua temperatura são parâmetros de grande importância para poder caracterizar o escoamento. O tempo de resposta da quantidade de movimento refere-se ao tempo necessário para uma partícula responder a uma mudança da velocidade da fase fluida (Crowe et al., 2012), sendo definido por:

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu_g} \quad (2.2)$$

onde ρ_p é a densidade da partícula, D é o diâmetro da partícula e μ_c é a viscosidade dinâmica da fase fluida.

O tempo de resposta térmica refere-se ao tempo necessário que uma partícula precisa para começar a mudar sua temperatura a partir de uma variação de temperatura da fase fluida (Crowe et al., 2012), ela é definida por:

$$\tau_T = \frac{\rho_p c_{pp} d_p^2}{12k_g} \quad (2.3)$$

onde c_{pp} é a capacidade calorífica da fase discreta e k_g é a condutividade da fase fluida.

Um outro tempo de resposta muito usado para caracterizar o escoamento é o tempo entre as colisões. Esse parâmetro é estimado a partir das diversas equações de frequência de colisões que existem na literatura (Crowe et al., 2012). O tempo entre as colisões é dado por:

$$\tau_C = \frac{1}{f_C} \quad (2.4)$$

sendo f_C a equação escolhida para representar a frequência de colisões.

4.1.3. Escoamento Diluído e Denso

Nos escoamentos gás-sólido, o regime podem ser classificados como diluídos ou densos dependendo do tempo de resposta, da concentração gás-sólido do escoamento e da escala espacial. Quando a razão $\tau_p/\tau_c \ll 1$, o comportamento do gás tem um efeito dominante, onde a partícula responde rapidamente a mudança da turbulência local sem a ocorrência de alguma colisão. Nesse caso o escoamento é classificado com regime diluído,

sendo governado predominantemente por forças de superfícies e volumétricas que atuam sobre as partículas (Yeoh and Tu, 2019; Gui et al., 2019).

Para o caso em que a razão é $\tau_p/\tau_c \gg 1$, o regime é classificado como denso. Neste caso o movimento das partículas sólidas será controlada pelas interações partículas-partículas e essas colisões entre a fase sólida influenciará significativamente o movimento da fase gasosa. Em um volume de controle confinado, o movimento das partículas após a colisão nas paredes é afetado pelas características da superfície e da propriedade do material (Yeoh and Tu, 2019; Gui et al., 2019).

Quando $\tau_p/\tau_c \approx 1$ pode-se considerar o escoamento gás-sólido como um regime intermediário entre o diluído e denso. Como τ_c depende da concentração de partícula, da taxa de carregamento das partículas e da turbulência, em regimes transientes ele pode varia muito em um curto espaço de tempo, assim o regime pode transitar instantaneamente entre diluído e denso. Em um cenário em que a distribuição da concentração de partículas for altamente não uniforme, o escoamento pode ser considerado com um regime localmente diluído ou localmente denso (Gui et al., 2019).

De acordo com o papel da colisão partícula-partícula nos diversos regimes de escoamento gás-sólido, podemos classificarlos como escoamento livre de colisão (regime diluído), escoamento dominado por colisão (regime denso com concentração média) e dominado por contato (regime denso com alta concentração), como apresentado na Figura 2.2.

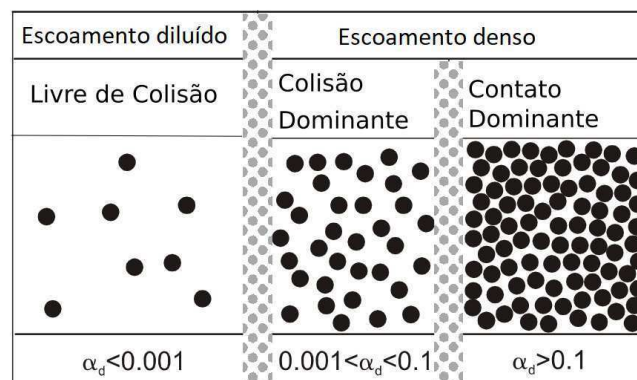


Figura 2.2 – Regimes de Escoamento.

Fonte: Adaptado de Crowe et al. (2012).

Em um escoamento dominado por colisão, as partículas colidem e se recuperam com uma trajetória diferente, sendo o tempo durante o contato pequeno comparado com o tempo entre as colisões. Um escoamento dominado por contato é aquele em que as

partículas estão em contato contínuo e as forças de contato são responsáveis pelo movimento das partículas (Crowe et al., 2012).

4.1.4. Acoplamento das Fases

O acoplamento entre as fases é um conceito básico que é utilizado para descrever qualquer escoamento multifásico. Esse acoplamento pode ocorrer por transferência de massa (evaporação e condensação), por transferência de quantidade de movimento (forças de interação entre as fases e adição de quantidade de movimento) e por transferência de energia entre as fases, como apresentado na Figura 2.3.

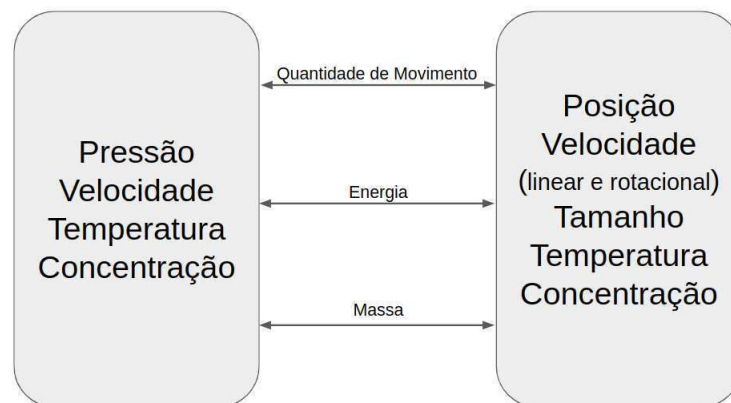


Figura 2.3 – Acoplamento entre as fases.

Fonte: Adaptado em Norouzi et al. (2019).

A fase fluida é geralmente escrita em termos da distribuição de pressão, velocidade, temperatura e concentração de espécies no campo do escoamento. Já a fase sólida é descrita pelo tamanho, posição, velocidade linear e angular, temperatura e concentração da espécie de cada partícula (Norouzi et al., 2019).

As interações entre as fases pode ser agrupada em três estratégias de resolução conforme apresentado na Figura 2.4.

No acoplamento de uma via, o movimento da fase sólida é afetada principalmente pelo movimento da fase fluida, enquanto que o movimento da fase sólida tem uma influência muito pequena na fase fluida. Nessa estratégia de solução, as equações da fase fluida podem ser resolvidas independente das equações das partículas, enquanto as equações das partículas precisam de informações das equações do fluido (Crowe et al., 2012; Norouzi et al., 2019).

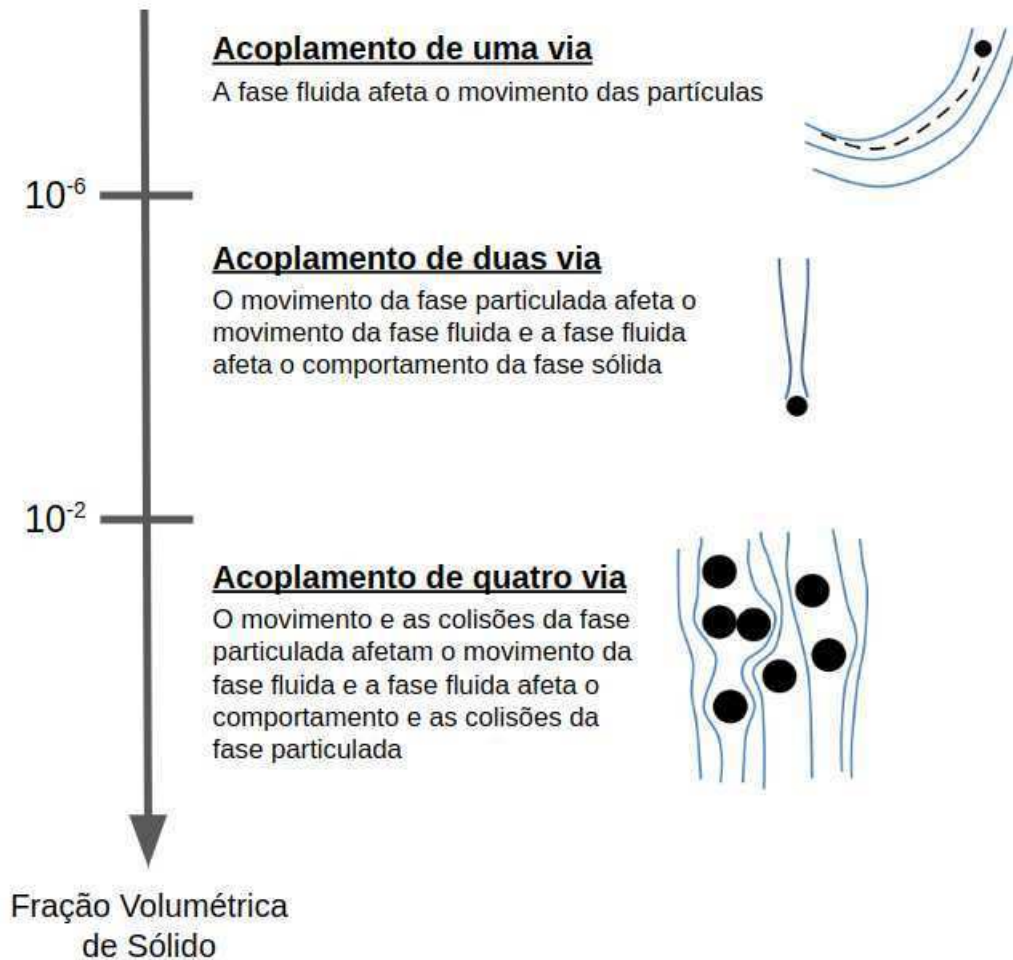


Figura 2.4 – Estratégias de acoplamento das fases.

Fonte: Adaptado de Norouzi et al. (2019).

No acoplamento de duas vias o movimento das partículas também afeta o movimento da fase fluida e vice-versa. Distúrbios de fluido induzidos por partículas em um fluxo turbulento carregado de partículas sem colisões é um exemplo desse acoplamento (Crowe et al., 2012; Norouzi et al., 2019).

O acoplamento de quatro vias é encontrado em situações em que, além das interações entre as fases sólidas e fluida, as colisões partícula-partícula também influenciam o movimento geral de ambas as fases. escoamentos densos em que as frequências de colisões partícula-partícula são altas, geralmente são resolvidos por essa estratégia (Norouzi et al., 2019).

4.2. Abordagem de Resolução

Encontramos atualmente uma vasta literatura sobre o escoamento gás-sólido (Crowe et al., 2012; Norouzi et al., 2019; Favero, 2014), porém esse assunto ainda é tema de muitas pesquisas e não está tão bem consolidado como estão os escoamentos monofásicos. Diante disso, a dinâmica dos fluidos computacionais tem se mostrado uma ferramenta poderosa para a simulação dos fenômenos que são observados nesse tipo de escoamento. Na literatura de escoamento particulado, podemos classificar as equações que regem esse fenômeno em duas abordagens principais: Euleriana-Euleriana e a Euleriana-Lagrangeana.

4.2.1. Abordagem Euleriana-Euleriana

Os métodos da abordagem Euleriana-Euleriana oferecem uma alternativa computacionalmente menos cara quando comparado com os métodos da abordagem Euleriana-Lagrangeana, pois não precisam rastrear as partículas individualmente, à custa de exigir uma modelagem adicional.

Segundo Ishii and Hibiki (2011), a principal hipótese assumida por esse modelo é de que ambas as fases são tratadas como fases contínuas, mesmo quando uma das fases é dispersa. Desse modo, ambas as fases respeitam a hipótese do contínuo e não existe uma interface separando-as, podendo coexistir tantas fases quanto forem consideradas em cada ponto do volume de controle. A quantidade relativa de cada fase é dado pelo valor da fração volumétrica nos elementos.

A formulação da abordagem Euleriana-Euleriana pode ser dividida em dois tipos de modelos principais: o modelo de mistura e o modelo multi-fluido.

No modelo de mistura ambas as fases são descritas como se fossem uma única fase, isso é possível adotando a hipótese de que as fases estão em equilíbrio local. Nesse modelo não são resolvidas as equações de balanço de cada fase, mas sim as equações da mistura, fornecendo apenas as propriedades e comportamento da mistura, não fornecendo informações sobre as interações e comportamento das diferentes fases. No caso do ASMM (*Algebraic Slip Mixture Model*) deve-se também propor uma relação para descrever a velocidade de escorregamento entre as fases (Favero, 2014).

O modelo Euleriano-Euleriano multi-fluido é mais geral e é resolvido a partir das equações de conservação de cada uma das fases. Neste modelo as fases são consideradas como sendo contínuas, interpenetrantes e representadas pelas equações de balanço médio.

Nesse modelo é adicionado novos termos em cada uma das equações de cada fase, sendo esses os responsáveis pelos fenômenos de interação entre as fases. Esse modelo é aplicável a qualquer regime de escoamento dependendo apenas de uma modelagem para turbulência e a escolha de equações de fechamento para as forças interfaciais (Rusche, 2002; Ishii and Hibiki, 2011). Portanto o modelo multi-fluido é naturalmente mais complexo que o modelo de mistura e mais é o mais adequado para descrever sistemas no qual as fases diferem significativamente em comportamento como, por exemplo, quando as fases tem campo de velocidade bem definido (Favero, 2014).

4.2.2. Abordagem Euler-Lagrange

Na abordagem Euleriana-Lagrangeana as partículas são tratadas como entidades discretas presentes no escoamento de uma fase contínua. Cada partícula pode ser modelada individualmente e a sua quantidade deve ser suficiente para representar o número real de partículas presente no sistema. Uma outra abordagem de modelagem é considerar partículas representativas, ou seja, uma partícula que representa o efeito de um conjunto de partículas que apresentem as mesmas propriedades (Araujo, 2010; Favero, 2014).

Essa abordagem utiliza as equações médias de conservação de massa, energia e quantidade de movimento para resolver a fase contínua (Euleriana), enquanto usa as equações da segunda lei de Newton para o cálculo das velocidades e das posições das partículas (Silva, 2008; Bennett, 2006).

Dentre a abordagem Euleriana-Lagrangeana, existem alguns modelos utilizados para calcular a velocidade e o posicionamento das partículas em meio ao fluido, os três mais usados são MP-PIC (*Multiphase Particle-in-cell*), DEM (*Discrete Element Method*) e DPM (*Discrete Particle Model*). Diante do trabalho realizado por Ferreira (2019), no qual identificou que o modelo DPM representava bem o comportamento do leito de jorro e por ser menos caro computacionalmente quando comparado com o DEM, optou-se por aplicar esse método ao longo da tese.

5. MODELO DA PARTÍCULA DISCRETA

O acoplamento do modelo da fase discreta com a fase contínua é resolvido pela abordagem euleriana através das equações de Navier-Stokes com o auxílio do método do volumes finitos. Foi primeiramente reportado na literatura por Tsuji et al. (1993) e

Hoomans et al. (1996), desde então esse modelo tem sido utilizado para uma ampla faixa de aplicação que envolve escoamento particulado, podendo-se citar aplicações em leito de jorro como por exemplo os trabalhos de Xu et al. (2016) e Ferreira (2019), aplicações em leito fluidizado como o de Fernandes et al. (2018) e Cuoci (2021).

No modelo DPM o movimento de cada partícula é calculado diretamente, incluindo as interações com outras partículas e com a fase contínua, o que torna a quantidade de partículas um fator limitante para sua utilização, pois para cada partícula adicionada é necessário a resolução de mais uma equação de partícula (Chiesa et al., 2005). Uma aproximação que pode ser usada para minimizar o esforço computacional é o conceito de partícula representativa, o que diminuiria a quantidade das equações de partículas a serem resolvidas.

5.1. Fase Gasosa

A fase gasosa em um escoamento reativo gás-sólido denso são descritos por quatro equações: a equação da continuidade, as equações de balanço de quantidade de movimento, de energia e de espécie química. Como veremos a seguir, existe um termo que representa a fração volumétrica de gás (α_g) e que é calculado por:

$$\alpha_g = 1 - \alpha_p \quad (2.5)$$

onde α_p é a fração volumétrica da fase sólida dada por:

$$\alpha_p = \frac{1}{V_{elem}} \sum_{i=1}^n W_{p,i} V_{p,i} \quad (2.6)$$

$W_{p,i}$ é a porção do volume da partícula ocupada no elemento atual da malha, $V_{p,i}$ é o volume da partícula e V_{elem} é o volume do elemento de malha.

5.1.1. Equação do Balanço de Massa

A equação da continuidade, também chamada de balanço de massa da fase gasosa é dada por:

$$\frac{\partial(\alpha_g \rho_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g) = \chi_{gp} \quad (2.7)$$

onde α_g , ρ_g e \mathbf{u}_g é a fração volumétrica, a densidade e o vetor velocidade da fase gasosa, respectivamente. χ_{gp} é o termo fonte que modela a transferência de massa entre o gás e a partícula.

5.1.2. Equação do Balanço de Quantidade de Movimento

A equação de balanço de quantidade de movimento da fase gasosa é escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial(\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g) = -\alpha_g \nabla p_g + \rho_g \alpha_g \mathbf{g} + \nabla \cdot (\alpha_g \boldsymbol{\tau}_g) + \mathbf{F}_{gp} \quad (2.8)$$

onde p_g é a pressão do gás e \mathbf{g} é a aceleração da gravidade. $\boldsymbol{\tau}_g$ é o tensor tensão do gás, modelado por:

$$\boldsymbol{\tau}_g = (\mu_{g,l} + \mu_{g,t}) \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) - \frac{2}{3} (\mu_{g,l} + \mu_{g,t}) (\nabla \cdot \mathbf{u}) I \quad (2.9)$$

onde $\mu_{g,l}$ e $\mu_{g,t}$ são respectivamente a viscosidade laminar e turbulenta para a fase gasosa. A viscosidade turbulenta é calculada usando o modelo de Smagorinsky (Smagorinsky, 1963).

$$\mu_{g,t} = C_s \Delta^2 \rho_g \sqrt{(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u})^2} \quad (2.10)$$

onde C_s é uma constante do modelo dado como 0.1. O comprimento característico turbulento Δ é avaliado como a raiz cúbica do produto do comprimento do volume de controle nas três direções, ou seja, $\Delta = (\Delta x \Delta y \Delta z)^{1/3}$. O termo \mathbf{F}_{gs} da Equação 2.8 significa a troca de quantidade de movimento entre as fases sólida e gasosa, podendo ser calculada por:

$$\mathbf{F}_{gp} = \frac{1}{V_{elem}} \sum_{i=0}^{N_p} W_{p,i} \mathbf{f}_i^{g-p} \quad (2.11)$$

onde \mathbf{f}_i^{g-p} são todas as forças de interação fluido-partícula que atuam sobre a partícula i .

5.1.3. Equação do Balanço de Energia

A equação do balanço de energia da fase gasosa é escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial (\alpha_g \rho_g c_{pg} T_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g c_{pg} T_g) = \nabla (\alpha_g k_g \nabla T_g) + Q_{gp} + Q_{r,g} + Q_{rad} \quad (2.12)$$

onde T_g e c_{pg} são a temperatura e capacidade calorífica do gás, respectivamente. k_g é condutividade térmica que inclui as componentes laminar e turbulenta e pode ser calculado por:

$$k_{g,l} + k_{g,t} = k_g = \frac{c_{pg} \mu_{g,t}}{Pr_t} \quad (2.13)$$

$Q_{r,g}$ são os calores gerado pela reação entre os componentes da fase gasosa. Q_{gp} representa a troca de calor entre a fase gasosa e a fase sólido calculada por:

$$Q_{gp} = \frac{1}{V_{elem}} \sum_{i=0}^{N_p} W_{p,i} Q_i^{g-p} \quad (2.14)$$

onde Q_i^{g-p} são todos os termos de transferência de calor entre a fase gasosa e fase particulada que estão atuando sobre a partícula i .

5.1.4. Equação do Balanço de Espécie Química

A equação do balanço de espécie química da fase gasosa é escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial (\alpha_g \rho_g Y_g^k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g Y_g^k) = \nabla (\alpha_g \rho_g D_{if,g}^k \nabla Y_g^k) + \chi_g^k + E_{gp}^k \quad (2.15)$$

onde Y_g^k e χ_g^k representam a fração mássica e a taxa de reação da espécie k entre os componentes da fase gasosa. $D_{if,g}^k$ é difusividade mássica que inclui as componentes laminar e turbulenta e pode ser calculado por:

$$D_{if,l}^k + D_{if,t}^k = D_{if,g}^k = \frac{\mu_{g,t}}{\rho_g Sc_t} \quad (2.16)$$

E_{gp}^k representa a taxa de consumo ou geração da espécie k ocasionado pela interação entre a fase gasosa e a fase particulada, calculada por:

$$E_{gp}^k = \frac{1}{V_{elem}} \sum_{i=0}^{N_p} W_{p,i} \chi_{i,k}^{g-p} \quad (2.17)$$

$\chi_{i,k}^{g-p}$ são todos os termos de transferência de espécie química entre a fase gasosa e fase particulada que estão atuando sobre a partícula i .

5.2. Fase Sólida

5.2.1. Equação de Movimento

O movimento de cada partícula i de massa m_i e volume V_i em um sistema é calculado usando a segunda lei de Newton para movimento dada por:

$$m_i \frac{d\mathbf{u}_i}{dt} = m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = f_i^{g-p} + \sum_{j=2}^{N_p} f_{i,j}^{p-p} + f_i^{p-w} + f_i^{grav} = \mathbf{f}_t \quad (2.18)$$

onde \mathbf{u}_i é a velocidade, \mathbf{r}_i é a posição da partícula i , f_i^{g-p} representa as forças que atuam nas partículas devido a interação com os fluidos, f_i^{grav} é a atuação do força gravitacional sobre a partícula i , $\sum_{j=2}^{N_p} f_{i,j}^{p-p}$ é o termo que modela as colisões partícula-partícula e f_i^{p-w} é o termo de colisão partícula-parede.

O momento angular de uma determinada partícula i é calculada por:

$$I_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \sum_{j=2}^{N_p} \mathbf{M}_{i,j}^{p-p} + \mathbf{M}_i^{p-w} + \mathbf{M}_i^{f-p} \quad (2.19)$$

$\sum_{j=2}^{N_p} \mathbf{M}_{i,j}^{p-p}$, \mathbf{M}_i^{p-w} e \mathbf{M}_i^{f-p} são os torques ocasionado devido as colisões partícula-partícula, partícula-parede e efeito fluido-partícula, respectivamente. \mathbf{I}_i é o momento de inércia, que para um partícula esférica de raio R_i é calculada por $\mathbf{I}_i = \frac{2}{5} m_i R_i^2$.

5.2.2. Equação de Energia

O comportamento da temperatura de cada partícula i é calculado pela seguinte equação:

$$m_i c_{pp,i} \frac{dT_i}{dt} = Q_i^{g-p} + \sum_{j=2}^{N_p} Q_{i,j}^{p-p} + Q_i^{rad} + Q_{r,i}^{g-p} \quad (2.20)$$

onde $c_{pp,i}$ e T_i é a capacidade térmica e a temperatura da partícula i do sistema, Q_i^{g-p} é o calor fornecido ou recebido pela interação entre fase gasosa e a fase particulada, $\sum_{j=2}^{N_p} Q_{i,j}^{p-p}$ é a troca de calor por condução entre as partículas, Q_i^{rad} é o efeito da radiação sobre a partícula e $Q_{r,i}^{g-p}$ é o calor de reação da fase sólida.

5.2.3. Equação de Espécie Química

O comportamento da massa de cada componente k em cada partícula i é calculado pela seguinte equação:

$$\frac{d(m_i Y_{p,i}^k)}{dt} = \chi_{i,k}^{g-p} \quad (2.21)$$

$\chi_{i,k}^{g-p}$ representa a taxa de reação da partícula para o componente k .

5.2.4. Equação de Massa

O comportamento da massa de cada partícula i é calculado pela seguinte equação:

$$\frac{dm_i}{dt} = \sum_{k=1}^{N_k} \chi_{i,k}^{g-p} = \chi_i^{g-p} \quad (2.22)$$

χ_i^{g-p} representa a taxa de reação da partícula.

5.3. Modelos de Interação Gás-Sólido

5.3.1. Interação de Massa

5.3.1..1 Reação Química O modelo cinético e as constantes de reação são desenvolvidos com base na suposição das partículas serem muito pequenas, de modo que os fenômenos interno são ignorados (Xue et al., 2011). Existem alguns modelos cinéticos reportados na literatura. Para o presente trabalho foi utilizado o seguinte modelo:

$$\chi_{i,k}^{g-p} = \pm \psi_k m_{i,k} \quad (2.23)$$

onde ψ_k é a taxa de reação do componente k e $m_{i,k}$ é massa do componente k na partícula i .

5.3.2. Interação de Quantidade de Movimento

5.3.2..1 Força de Arraste O modelo de arraste é de vital importância para descrever um sistema gás-partícula, representando a troca de quantidade de movimento entre as fases. A força de arraste (\mathbf{f}_i^A) de uma única partícula i é dada por:

$$\mathbf{f}_i^{g-p} = \mathbf{f}_i^A = \frac{V_{p,i} D_C}{\alpha_p} (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_{p,i}) \quad (2.24)$$

O modelo de arraste de Gidaspow que combina a correlação de Ergun aplicável para sistemas densos (Ergun and Orning, 1949) com a correlação Wen-Yu que é usada para sistemas diluídos (Yang et al., 2021a) é apropriada para a maioria das modelagem gás-sólido. O modelo de Gidaspow é escrito como:

$$D_c = \begin{cases} \frac{150(1-\alpha_g)^2 \mu_g}{\alpha_g d_p^2} + \frac{1.75 \rho_g (1-\alpha_g) |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_p|}{d_p}, \alpha_g \leq 0.8 \\ \frac{3}{4} \frac{\alpha_g \rho_g (1-\alpha_g) |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_p|}{d_p} C_D \alpha_g^{-2.65}, \alpha_g > 0.8 \end{cases} \quad (2.25)$$

onde

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}), Re_p < 1000 \\ 0.44, Re_p \geq 1000 \end{cases} \quad (2.26)$$

e

$$Re_p = \frac{\rho_g \alpha_g |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_p| d_p}{\mu_g} \quad (2.27)$$

5.3.2..2 Força da Gravidade A força da gravidade que atua sobre a partícula é dada por:

$$f_i^{grav} = \rho_i V_{p,i} \mathbf{g} \quad (2.28)$$

onde ρ_i e $V_{p,i}$ é a densidade e o volume da partícula i e \mathbf{g} é a aceleração da gravidade.

5.3.3. Interação de Energia

5.3.3..1 Convecção Vários modelos têm sido propostos para o termo de transferência de calor entre fases gás-sólida pelo mecanismo de convecção (Li and Mason, 2000; Gunn, 1978). O modelo de Ranz e Marshall (Clissold et al., 2020) foi adotado para uma única esfera se movendo através de um fluido e desenvolvido para o experimento de evaporação de gotas de água enquanto o modelo de Li e Mason (Gunn, 1978) representa um modelo numérico para escoamento bifásico gás-sólido com transferência de calor em tubos de transporte pneumático. Neste estudo, a Equação 2.29 é adotada, pois foi utilizado em

trabalhos de pirólise como os de Yang et al. (2021a) e Yang et al. (2021b). A transferência de calor entre a fase gasosa e a fase sólida pelo mecanismo de converção é definido como:

$$Q_i^{g-p} = \frac{k_g N_{u,p}}{d_p} A_{p,i} (T_g - T_p) \quad (2.29)$$

onde d_p e $A_{p,i}$ são o diâmetro e área de uma partícula esfera. $N_{u,s}$ é o número de Nusselt, calculado por $N_{u,p} = 2 + 0.6R_{e,s}^{0.5}P_r^{0.33}$, sendo R_e o número de Reynolds e P_r o número de Prandtl.

5.3.3..2 Radiação Para escoamentos gás-sólido que envolvem altas temperaturas, as partículas podem trocar calor por radiação. A taxa de transferência de calor por este mecanismo torna-se significativa quando a temperatura é de pelo menos 400°C, podendo ser ignorada para menores temperaturas. (Bergman and Lavine, 2017) Para avaliar a taxa de transferência de calor devido à radiação, supõe-se que a partícula i troque calor com outras partículas e fluidos em seu ambiente circundante (Norouzi et al., 2019), esse comportamento é escrito por:

$$Q_i^{rad} = \sigma \epsilon_i A_i (T_{se,i}^4 - T_i^4) \quad (2.30)$$

onde σ é a constante de Stefan-Boltzmann ($5.67 \cdot 10^{-5} W/m^2 K^4$), ϵ_i é a emissividade da partícula i e $T_{se,i}$ é a temperatura do ambiente circundante.

5.3.3..3 Entalpia de Reação Existem situações em que uma reação química ocorre na superfície ou no interior das partículas. Além disso, a mudança de fase (evaporação, condensação, cristalização, etc.) também podem ocorrer nas partículas. O calor associado a estes fenômenos para cada partícula i é:

$$Q_{r,i}^{g-p} = A_{p,i} \chi_i \Delta H_p \quad (2.31)$$

Nesta equação, ΔH_p é a variação de entalpia que ocorrem na partícula expresso com base na unidade de massa da partícula e χ_i é a taxa de reação em termos de taxa de massa por unidade de superfície da partícula. A multiplicação da superfície nesta equação aparece porque a taxa χ_i é considerada expressa por unidade de superfície da partícula. Obviamente, se a taxa for expressa por unidade de volume da partícula, a superfície deve ser substituída pelo volume da partícula. (Norouzi et al., 2019)

5.4. Modelos de Colisões

Em muitos dos escoamentos particulados o movimento das partículas é controlado pela colisão partícula-partícula. E para isso, existem duas abordagens dependendo da natureza das partículas, o modelo de esfera rígida e o modelo de esfera macia.

5.4.1. Modelo de Esfera Rígida

O modelo de esfera rígida relatada pela primeira vez na literatura por Campbell and Brennen (1985), tem as trajetórias das partículas determinadas por colisões binárias de conservação de quantidade de movimento. As interações entre as partículas são consideradas como sendo aditivas em pares e instantâneas. Durante a simulação, as colisões serão processadas uma a uma de acordo com a ordem em que os eventos ocorrem (van der Hoef et al., 2006; Deen et al., 2007).

Para sistemas diluídos, os modelos de esfera rígida são consideravelmente mais rápidos que os modelos de esfera macia. Em sistemas densos ou quando as partículas apresentam um baixo coeficiente de restituição normal, as colisões levarão a uma diminuição drástica da energia cinética. Este comportamento é conhecido como colapso inelástico de McNamara and Young (1992), no qual as frequências de colisões divergem à medida que as velocidades das partículas vão desaparecendo. Nesse caso o método da esfera rígida se torna inútil (van der Hoef et al., 2006; Deen et al., 2007).

Nesse modelo assume-se que as forças de interação são impulsivas e, portanto, todas as outras forças são desprezíveis durante uma colisão (Deen et al., 2007). Para um melhor entendimento desse modelo considere duas esferas a e b, de raios R_a e R_b que estão colidindo e que possuem posições vetoriais \mathbf{r}_a e \mathbf{r}_b , como ilustrado na Figura 2.5.

As velocidades das partículas antes da colisão são indicadas pelo subscrito 0 e a velocidade relativa no ponto de contato c é definida por:

$$\mathbf{u}_{p,ab} = \mathbf{u}_{p,ac} - \mathbf{u}_{p,bc} = (\mathbf{u}_a - \mathbf{u}_b) - (\mathbf{R}_a \boldsymbol{\omega}_a - \mathbf{R}_b \boldsymbol{\omega}_b) \times \mathbf{n}_{ab} \quad (2.32)$$

O vetor unitário normal e tangencial são definidos por:

$$\mathbf{n}_{ab} = \frac{\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b}{|\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a|} \quad (2.33)$$

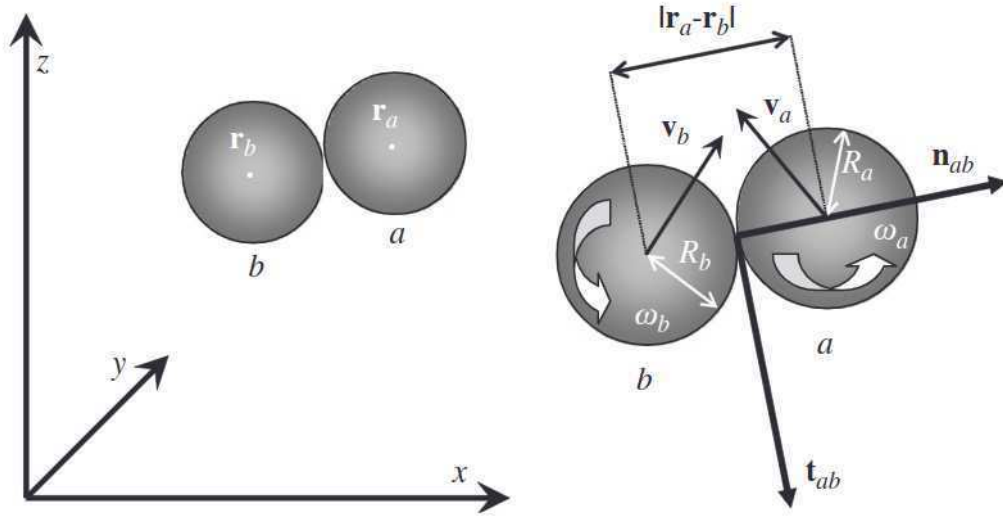


Figura 2.5 – Sistema de coordenadas utilizado na descrição dos modelos de colisão de partículas discretas.

Fonte: Deen et al. (2007).

$$\mathbf{t}_{ab} = \frac{\mathbf{u}_{p,ab0} - \mathbf{n}_{ab} \cdot \mathbf{u}_{p,ab0}}{|\mathbf{u}_{p,ab0} - \mathbf{n}_{ab} \cdot \mathbf{u}_{p,ab0}|} \quad (2.34)$$

Para uma colisão binária dessas esferas, as seguintes equações pode ser derivadas aplicando a segunda e a terceira lei de Newton:

$$m_a (\mathbf{u}_{p,a} - \mathbf{u}_{p,a0}) = -m_b (\mathbf{u}_{p,b} - \mathbf{u}_{p,b0}) = \mathbf{J} \quad (2.35)$$

$$\frac{I_a}{R_a} (\boldsymbol{\omega}_a - \boldsymbol{\omega}_{a,0}) = -\frac{I_b}{R_b} (\boldsymbol{\omega}_b - \boldsymbol{\omega}_{b,0}) = -\mathbf{n}_{ab} \times \mathbf{J} \quad (2.36)$$

Manipulando as Equações 2.35 e 2.36, podemos obter:

$$\mathbf{u}_{p,ab} - \mathbf{u}_{p,ab0} = \frac{7\mathbf{J} - 5\mathbf{n}_{ab} (\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}_{ab})}{2m_{ab}} \quad (2.37)$$

onde m_{ab} é massa reduzida, que é dada por:

$$m_{ab} = \left(\frac{1}{m_a} + \frac{1}{m_b} \right)^{-1} \quad (2.38)$$

Para calcular as velocidades pós-colisão, um modelo de fechamento composto por três parâmetros é usado para descrever o vetor impulso \mathbf{J} . Os parâmetros são o coeficiente de restituição normal ($0 \leq e_n \leq 1$),

$$\mathbf{u}_{p,ab} \cdot \mathbf{n}_{ab} = -e_n (\mathbf{u}_{p,ab0} \cdot \mathbf{n}_{ab}) \quad (2.39)$$

o coeficiente de fricção dinâmica ($\nu \geq 0$),

$$|\mathbf{n}_{ab} \times \mathbf{J}| = -\mu (\mathbf{n}_{ab} \cdot \mathbf{J}) \quad (2.40)$$

e o coeficiente de restituição tangencial ($0 \leq \beta_0 \leq 1$),

$$\mathbf{n}_{ab} \times \mathbf{u}_{ab} = -\beta_0 (\mathbf{n}_{ab} \times \mathbf{u}_{ab,0}) \quad (2.41)$$

A componente normal do vetor de impulso é dado por:

$$\mathbf{J}_n = -(1 + e_n) m_{ab} (\mathbf{u}_{p,ab0} \cdot \mathbf{n}_{ab}) \quad (2.42)$$

Para a componente tangencial, podem ser distinguidos dois tipos de colisões, colisões por aderência ou por deslizamento. Se a componente tangencial da velocidade relativa for suficientemente alta em comparação com os coeficientes de atrito e restituição tangencial, o deslizamento grosseiro ocorre ao longo de toda a duração do contato e a colisão é do tipo deslizamento. As colisões não deslizantes são do tipo aderente. Quando β_0 é igual a zero, a componente tangencial da velocidade relativa torna-se zero durante uma colisão adesiva. Quando β_0 for maior que zero em tal colisão, ocorrerá a reversão da componente tangencial da velocidade relativa. O critério para determinar o tipo de colisão com base nas informações de pré-colisão é a seguinte:

$$\mathbf{J}_t = \begin{cases} -\frac{2}{7} (1 + \beta_0) \times m_{ab} (\mathbf{u}_{p,ab0} \cdot \mathbf{t}_{ab}), & \text{se } \mu J_n \leq \frac{2}{7} (1 + \beta_0) m_{ab} (\mathbf{u}_{p,ab0} \cdot \mathbf{t}_{ab}) \\ \mu J_n, & \text{se } \mu J_n > \frac{2}{7} (1 + \beta_0) m_{ab} (\mathbf{u}_{p,ab0} \cdot \mathbf{t}_{ab}) \end{cases} \quad (2.43)$$

onde as duas equações descrevem colisões do tipo aderência e deslizamento, respectivamente.

De posse da definição de \mathbf{J} (Equações 2.43 e 2.42), as velocidades pós-colisão podem agora ser calculadas a partir das Equações 2.35 e 2.36.

Em colisões partícula-parede, a massa da partícula b (ou seja, a parede) é considerada infinitamente grande, o que torna todos os termos contendo $1/m_b$ iguais a zero e, conseqüentemente, $m_{ab} = m_a$.

5.4.2. Modelo de Esfera Macia

O modelo de esfera macia originalmente desenvolvido por Cundall and Strack (1979) foi a primeira técnica de simulação da dinâmica de partícula publicada na literatura. Nesse modelo, as partículas podem se sobrepor levemente, tendo as forças de contato subsequentemente calculada a partir do histórico de deformação usando um esquema de força de contato. Os modelos de esferas macia permitem a sobreposição de múltiplas partículas, embora a força de contato líquida seja obtida pela adição de todas as interações de pares. O passo de tempo para o cálculo da força de contato deve ser cuidadosamente escolhido de forma que se consiga capturar as interações entre as partículas (van der Hoef et al., 2006; Deen et al., 2007).

Existem alguns modelos de esfera macia reportados na literatura que diferem principalmente entre si no que diz respeito ao esquema de força de contato utilizado. Kafui et al. (2002) desenvolveram um DPM baseado na teoria da mecânica de contato, permitindo que a colisão das partículas seja especificada diretamente em termos de propriedades do material como atrito, elasticidade, elasto-plasticidade e auto-adesão. O modelo esfera macia foi acoplado a modelos que descrevem a transferência de massa e reações químicas para estudar a decomposição do ozônio em partículas revestidas de catalisador em um leito fluidizado bidimensional por Limtrakul et al. (2004).

No modelo de esfera macia, as forças de contato da partícula a é calculada como a soma das forças de contato de todas as partículas em uma lista de contato da partícula a , ou seja, todas as partículas b , incluindo as paredes, que estão em contato com a partícula a . Essa força é calculada por:

$$\mathbf{F}_{contato,a} = \sum_{\forall b \in listaContato} (\mathbf{F}_{ab,n} + \mathbf{F}_{ab,t}) \quad (2.44)$$

onde $\mathbf{F}_{ab,n}$ e $\mathbf{F}_{ab,t}$ representam as forças de contato normal e tangencial entre as partículas a e b .

O torque depende apenas das forças de contanto tangencial, podendo ser definida por:

$$\mathbf{T}_a = \sum_{\forall b \in listaContato} (R_a \mathbf{n}_{ab} \times \mathbf{F}_{ab,t}) \quad (2.45)$$

O cálculo da força de contato entre duas partículas é realmente bastante compli-

cado. Modelos mecânicos de contato podem ser simplificados para reduzir o tempo de cálculo, mantendo precisão suficiente no agregado energético das colisões. Nesse sentido, muitos modelos simplificados têm sido propostos, o mais simples é originalmente proposto por Cundall and Strack (1979), onde o modelo linear-spring e o modelo dashpot é empregado para calcular as forças de contato. Nesse modelo, a componente normal da força de contato entre duas partículas a e b pode ser calculada por:

$$\mathbf{F}_{ab,n} = -k_n \delta_n \mathbf{n}_{ab} - \eta_n \mathbf{u}_{p,ab,n} \quad (2.46)$$

onde k_n é a rigidez normal da mola, \mathbf{n}_{ab} é o vetor normal unitário, η_n o coeficiente normal de amortecimento e $\mathbf{v}_{ab,n}$ é a velocidade normal relativa que é obtida através de:

$$\mathbf{u}_{p,ab,n} = (\mathbf{u}_{p,ab} \cdot \mathbf{n}_{ab}) \mathbf{n}_{ab} \quad (2.47)$$

O coeficiente de amortecimento normal é calculado por:

$$\eta_n = \begin{cases} \frac{-2 \ln e_n \sqrt{m_{ab} k_n}}{\sqrt{\pi^2 + \ln^2 e_n}}, & \text{se } e_n \neq 0 \\ 2\sqrt{m_{ab} k_n}, & \text{se } e_n = 0 \end{cases} \quad (2.48)$$

onde e_n é o coeficiente de restituição normal e m_{ab} é a massa reduzida. Nas colisões partícula-parede a massa da partícula b é tratada como parede e pode considerada infinitamente grande, podendo ser aproximada por $m_{ab} = m_a$.

Para a componente tangencial da força de contato é usada a seguinte equação:

$$\mathbf{F}_{ab,t} = \begin{cases} -k_t \delta_t - \eta_t \mathbf{v}_{ab,t}, & \text{se } |\mathbf{F}_{ab,t}| \leq \mu |\mathbf{F}_{ab,n}| \\ -\mu |\mathbf{F}_{ab,n}| \mathbf{t}_{ab}, & \text{se } |\mathbf{F}_{ab,t}| > \mu |\mathbf{F}_{ab,n}| \end{cases} \quad (2.49)$$

onde k_t , δ_t , η_t e μ_f são as a rigidez da mola tangencial, deslocamento tangencial, coeficiente de amortecimento tangencial e coeficiente de atrito, respectivamente. A velocidade relativa $\mathbf{v}_{ab,t}$ é definida como:

$$\mathbf{u}_{p,ab,t} = \mathbf{u}_{p,ab} - \mathbf{u}_{p,ab,n} \quad (2.50)$$

O coeficiente de amortecimento tangencial é definido como:

$$\eta_t = \begin{cases} \frac{-2ln\beta_0\sqrt{\frac{2}{7}m_{ab}k_t}}{\sqrt{\pi^2 + ln^2\beta_0}}, & \text{se } \beta_0 \neq 0 \\ 2\sqrt{\frac{2}{7}m_{ab}k_n}, & \text{se } \beta_0 = 0 \end{cases} \quad (2.51)$$

onde β_0 é o coeficiente de fricção. O deslocamento tangencial é dado por:

$$\delta_t = \begin{cases} \delta_{t,0}\mathbf{H} + \int_{t_0}^t v_{ab,t}dt, & \text{se } |\mathbf{F}_{ab,t}| \leq \mu|\mathbf{F}_{ab,n}| \\ \frac{\mu}{k_t}|\mathbf{F}_{ab,n}|\mathbf{t}_{ab}, & \text{se } |\mathbf{F}_{ab,t}| > \mu|\mathbf{F}_{ab,n}| \end{cases} \quad (2.52)$$

Capítulo 3

Metodologia

A finalidade deste capítulo é apresentar todos os procedimentos realizados para a obtenção dos resultados numéricos da presente pesquisa. Inicia-se com a definição do problema, passa pelas considerações e procedimentos para a construção da geometria e para a geração da malha, apresenta os modelos matemáticos, as propriedades dos materiais e as condições de contorno, e finaliza com os métodos numéricos utilizados.

1. DEFINIÇÃO E ABORDAGEM DO PROBLEMA

O presente trabalho se propõe a estudar a pirólise do bagaço da cana-de-açúcar em um leito de jorro empregando uma modelagem CFD, a fim de obter o comportamento da dinâmica e da transferência de calor e massa envolvidas no processo. De posse de um modelo matemático que represente fielmente o comportamento da pirólise, será analisado o posicionamento da injeção das partículas de biomassa, os efeitos da velocidade e temperatura dos gases, além do diâmetro das partículas de biomassa, de modo a obter um processo mais otimizado.

Para atingir o objetivo estabelecido, dividiu-se o estudo nas cinco etapas descritas a seguir:

- 1^a Etapa - Definição dos modelos de transferência de massa, quantidade de movimento, energia e espécie química dos gases e das partículas de biomassa.

Para a realização dessa etapa, simulou-se o comportamento da pirólise da biomassa para uma única partícula, tomando como base o estudo de Papadikis et al. (2009c).

- 2ª Etapa - Substituição do mecanismo de reação semiglobal de dois estágios pelo mecanismo de reação multicomponentes e multiestágios.

Com os modelos matemáticos definidos e validados na etapa anterior, substituiu-se a cinética de reação semiglobal de dois estágios por uma cinética de reação multicomponentes e multiestágios. Realizou-se novamente uma simulação do comportamento da pirólise de biomassa para um única partícula e confrontou os resultados de rendimento da reação com os reportados nos trabalhos de Xue et al. (2012), Yang et al. (2021b), Clissold et al. (2020) e Suttibak (2017).

- 3ª Etapa - Simulação do comportamento do leito de partículas inertes.

Foi realizada uma terceira simulação, porém desta vez, considerando apenas a presença de um leito de partículas inertes. O objetivo dela é validar o comportamento do modelo DPM atuando em um conjunto de partículas. O resultado foi comparado com o apresentado no trabalho de Xu et al. (2016).

- 4ª Etapa - Simulação da pirólise da cana-de-açúcar com a variação do posicionamento da injeção das partículas de biomassa.

Com os modelos matemáticos e a cinética de reação validados, adaptou-se o estudo realizado por Xu et al. (2016) e simulou-se a pirólise da cana-de-açúcar em um leito de jorro. A adaptação consistiu em converter a vazão de ar que entrava no equipamento a temperatura ambiente em uma vazão de nitrogênio a uma temperatura de 500°C, além de inserir a entrada da biomassa no leito. Foram mantidos os diâmetros das partículas inertes, a quantidade de partículas no leito e as dimensões da geometria do equipamento. Realizou-se três simulações para identificar o efeito da posição de injeção da biomassa durante a pirólise.

- 5ª Etapa - Realização de um DoE da pirólise da cana-de-açúcar.

A partir dos resultados obtidos na etapa 4, foi escolhido o cenário cuja posição de entrada da biomassa oferecia o maior potencial de otimização da pirólise. Então, foi realizado um planejamento experimental numérico do tipo fatorial 2^k para entender como a velocidade do gás, a temperatura do gás e o diâmetro das partículas de biomassa afetam a conversão da reação, de modo a obter o cenário mais otimizado.

O resumo das simulações realizadas para se atingir o objetivo da presente pesquisa está presente na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 – Resumo das simulações realizadas.

Simulação	Artigo Referência	Resumo
1	Papadikis et al. (2009c)	Simulação da pirólise de uma única partícula usando a cinética de reação semiglobal de dois estágios.
2 - 4	Xue et al. (2012)	Simulações da pirólise de uma única partícula de biomassa (2-celulose pura, 3-carvalho vermelho, 4-bagaço da cana-de-açúcar) usando a cinética de reação multicomponentes e multiestágios.
5	Xu et al. (2016)	Simulação do comportamento do leito de partículas inertes.
6 - 8	Xu et al. (2016)	Simulações da pirólise da cana-de-açúcar com a variação do posicionamento da injeção das partículas (8-base, 9-meio, 10-topo).
9 - 16	Xu et al. (2016)	Simulações da pirólise da cana-de-açúcar com a variação da velocidade do gás, da temperatura do gás e diâmetro das partículas de biomassa, segundo o DoE apresentado na Seção 7..

Para as duas primeiras etapas da pesquisa utilizou-se um computador com processador Intel Core i5-7400 de 3.0 GHz com quatro núcleos de processamento, 16 GB de memória RAM e sistema operacional Linux. Devido ao esforço computacional presente na simulação do leito de partículas, as demais etapas foram simuladas em computador com processador Intel Xeon Gold 5118 de 2,30 GHz com vinte e quatro núcleos de processamento e 32 GB de memória RAM, também com sistema operacional Linux.

2. DOMÍNIO DE ESTUDO

Em problemas que envolvem aplicações de CFD, faz-se necessário a construção da geometria do domínio de estudo com o auxílio de uma ferramenta CAD. Para tanto, foi definido os limites de atuação do estudo para cada uma das simulações realizadas.

O aparato experimental usado no trabalho realizado por Papadikis et al. (2009c), que serviu de referência para a simulação 1, é um reator de escala laboratorial de pirólise rápida da Universidade de Aston. O equipamento tem formato cilíndrico com 260 mm de altura e 40 mm de diâmetro. Na região inferior, por onde o nitrogênio entra, existe uma placa porosa com o objetivo de melhorar a distribuição do fluido. O esquemático desse reator é apresentado na Figura 3.1.

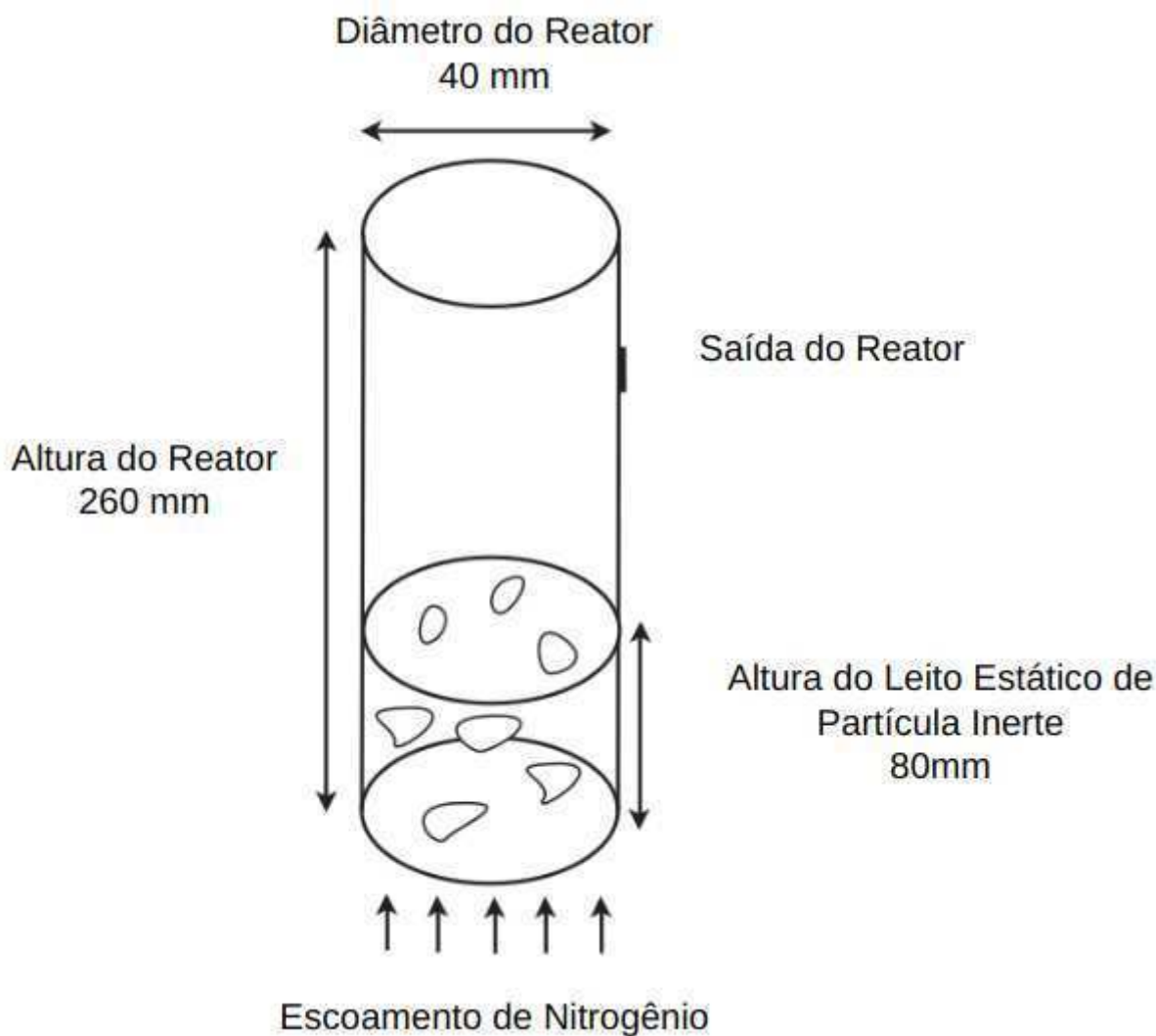


Figura 3.1 – Esquemático do equipamento estudado por Papadikis et al. (2009c).

Fonte: Adaptado de Papadikis et al. (2009c)

Como o objetivo da simulação é obter o comportamento da temperatura, massa, densidade e os rendimentos da reação de uma única partícula de biomassa ao interagir com o fluido, optou-se por simplificar a geometria de Papadikis et al. (2009c) para um formato pseudo 2D com 7 mm de espessura, ganhando assim tempo de processamento durante a simulação. O resultado da simplificação é mostrado na Figura 3.2.

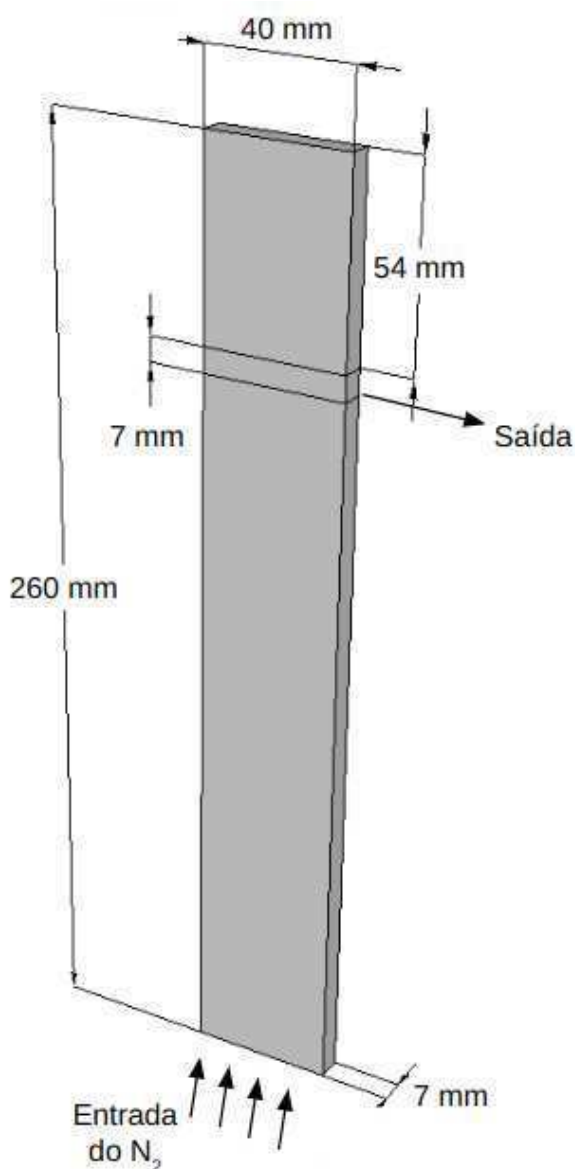


Figura 3.2 – Geometria adaptada do trabalho de Papadikis et al. (2009c) e utilizada na simulação 1.

Para adotar essa simplificação, tomou-se como base o trabalho realizado por Li et al. (2012), no qual afirmaram que a espessura do leito deve conter pelo menos 12,3 vezes o tamanho da partícula para que o efeito parede possa ser ignorado, não influenciando o comportamento das partículas.

Xue et al. (2012), que foi usado como referência para as simulações 2-4, realizaram o estudo experimental em um reator de leito fixo borbulhante. O aparato experimental consiste em um sistema de alimentação, um reator de leito fluidizado borbulhante, dois ciclones para separação de sólidos, um sistema de coleta de bio-óleo e um micro cromatógrafo a gás Varian CP-4900. Um diagrama do processo é apresentado na Figura 3.3

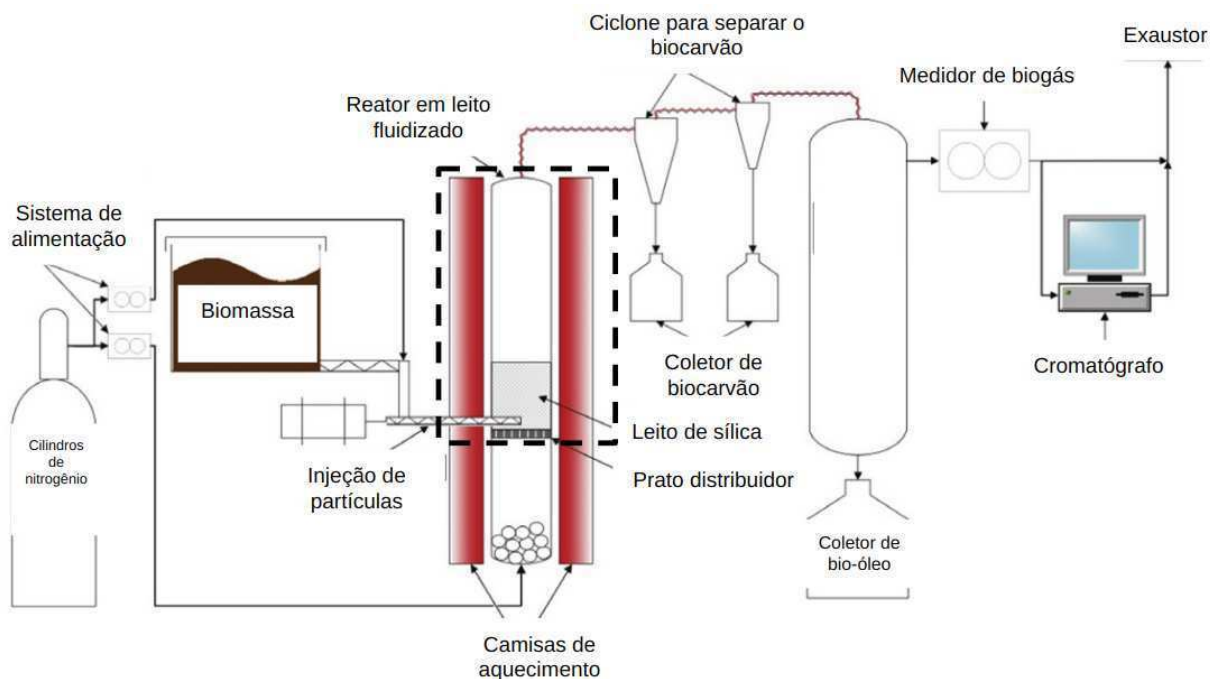


Figura 3.3 – Aparato experimental usado por Xue et al. (2012).

Fonte: Adaptado de Xue et al. (2012)

Com o objetivo de simular o comportamento da cinética de reação de multicomponentes e multiestágios (Simulação 2-4), simplificou-se o reator de Xue et al. (2012) para uma geometria pseudo 2D com 7 mm de espessura com base no trabalho realizado por Hu et al. (2019b) e Li et al. (2012). A finalidade da simplificação foi minimizar o custo computacional da simulação da pirólise de biomassa. A região de entrada do gás inerte está localizada na parte inferior e a saída dele, juntamente com os gases de pirólise está localizada na parte superior do equipamento. Existe uma região de entrada de biomassa no lado esquerdo da geometria, com uma altura de 7,3 mm e localizada a 325,95 mm do topo do equipamento. A geometria construída está apresentada na Figura 3.4

A geometria construída para a realização das simulações 5-16 tomou como base o aparato experimental utilizado pelo trabalho de Xu et al. (2016). O equipamento

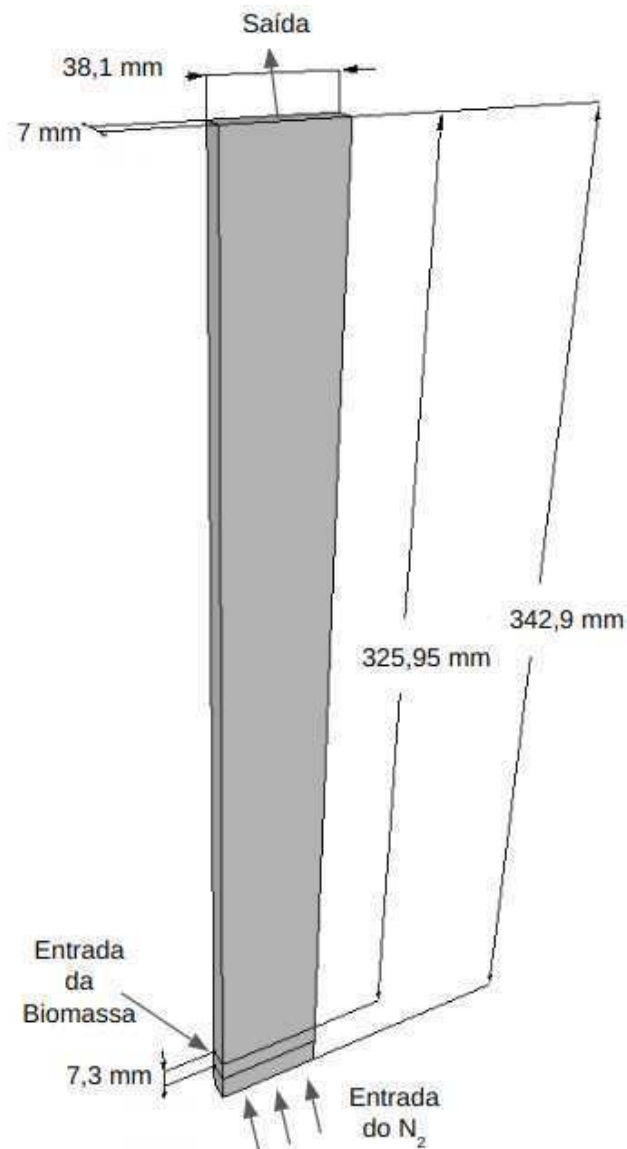


Figura 3.4 – Geometria adaptada do trabalho de Xue et al. (2012) e utilizada nas simulações 2-4.

consiste em um leito de jorro pseudo-2D com seção transversal de 134 mm × 32 mm e altura de 600 mm. O gás entra com uma distribuição uniforme através de um bocal no centro da base do dispositivo. O bocal tem uma seção transversal de 6 mm × 32 mm. Para essa geometria, não foi realizada nenhuma simplificação, portanto a geometria construída representa fielmente o equipamento de Xu et al. (2016). Tanto o leito de jorro experimental, quanto a sua representação computacional está apresentado na Figura 3.5.

Foram definidas seções transversais de 10 mm x 32 mm representando a entrada de biomassa nas alturas 20 mm (base), 130 mm (meio) e 450 mm (topo) na geometria usada por Xu et al. (2016), como apresentado na Figura 3.6

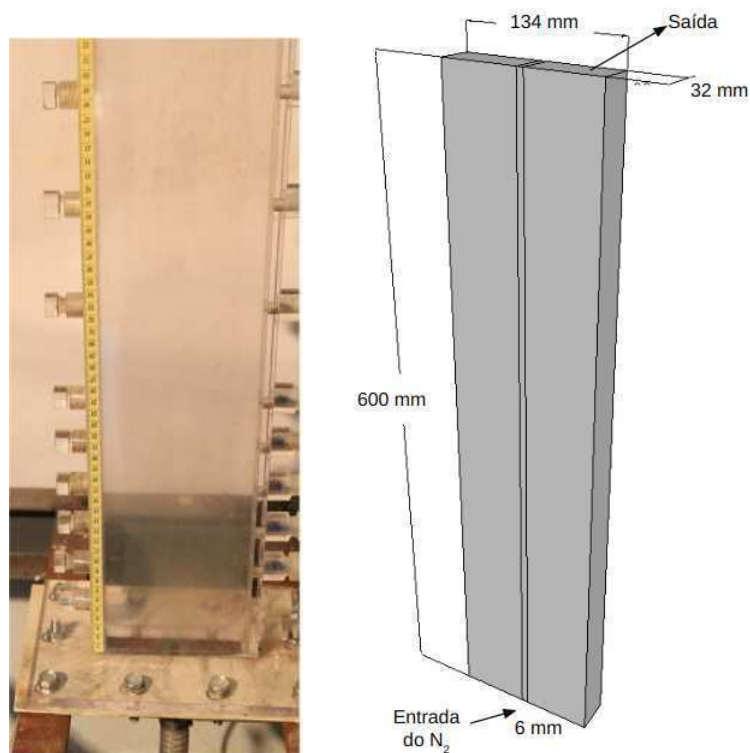


Figura 3.5 – Aparato experimental e a geometria construída para a simulação 5.

Fonte: Xu et al. (2016)

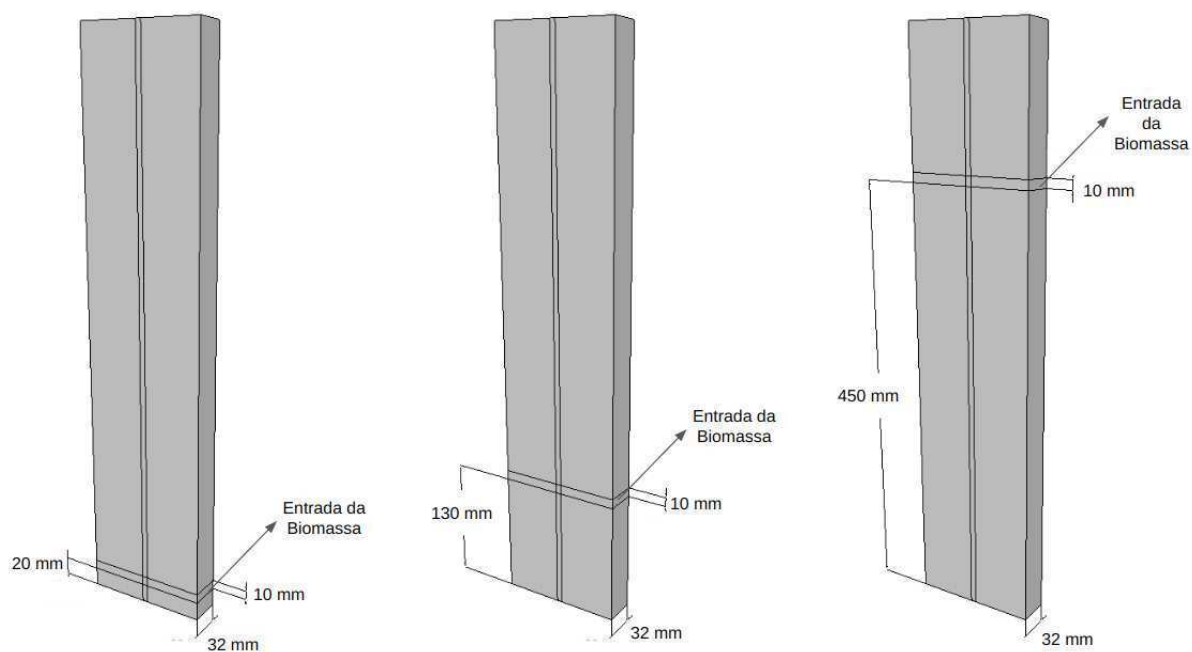


Figura 3.6 – Geometrias para diferentes posicionamentos de injeção das partículas de biomassa utilizadas nas simulações 6-16.

3. DOMÍNIO COMPUTACIONAL

Com as geometrias do domínio de estudo construídas, o próximo passo de uma análise CFD é a geração da malha computacional. Em outras palavras, é subdividir o domínio em vários subdomínios menores e não sobrepostos, em que se dará a solução do problema.

A precisão de uma solução CFD depende diretamente do número de elementos que a malha possui. Em geral, quanto maior a quantidade de elementos, melhor a precisão da simulação. Porém, quanto maior for o refinamento da malha, maior o seu custo em termos de processamento computacional e tempo de cálculo (Versteeg and Malalasekera, 2007). Por isso, se faz necessário a realização de uma metodologia chamada de análise de dependência de malha. Ela consiste em simular o estudo em questão com diversos tamanhos de elementos de malha, de modo a verificar a quantidade ideal que não afete nos resultados obtidos. No entanto, as simulações numéricas em CFD que envolvem escoamento de partículas lagrangeanas com acoplamento de quatro vias têm uma peculiaridade a ser levada em consideração. O tamanho do elemento da malha é limitado pelo tamanho da partícula, no qual tem que ser pequeno o suficiente para ter acurácia, e em contrapartida, tem que ser grande o suficiente para garantir uma boa variação temporal e espacial das frações das partículas sólidas. Geralmente nesses casos, se faz indispensável o uso de esquemas numéricos mais robustos para compensar o tamanho dos elementos.

Diante do apresentado, Boyce et al. (2015) e Müller et al. (2009) realizaram estudos sobre malhas em escoamento euleriano-lagrangeano de quatro vias em leito fluidizado e em leito de jorro, respectivamente, chegando na conclusão que o elemento da malha de fluido deve ter um comprimento de aproximadamente 3-4 vezes o tamanho do diâmetro da partícula para resolver as equações de balanço da fase gasosa e as equações de movimentações das partículas. Adotou-se as recomendações desses estudos e foram geradas malhas hexaédricas com os números de divisões ao longo das direções x, y e z, a quantidade total de elementos e nós conforme apresentadas na Tabela 3.2.

As malhas utilizadas nessa pesquisa foram geradas no *software* Salome 9.8 e estão apresentadas na Figura 3.7.

Tabela 3.2 – Resumo das malhas utilizadas.

Malha	N° de Divisões (x,y,z)	N° de Elementos	N° de Nós
Simulação 1	(27x4x174)	18792	24500
Simulação 2-4	(20x4x176)	14080	18585
Simulação 5-16	(32x8x147)	39984	46620

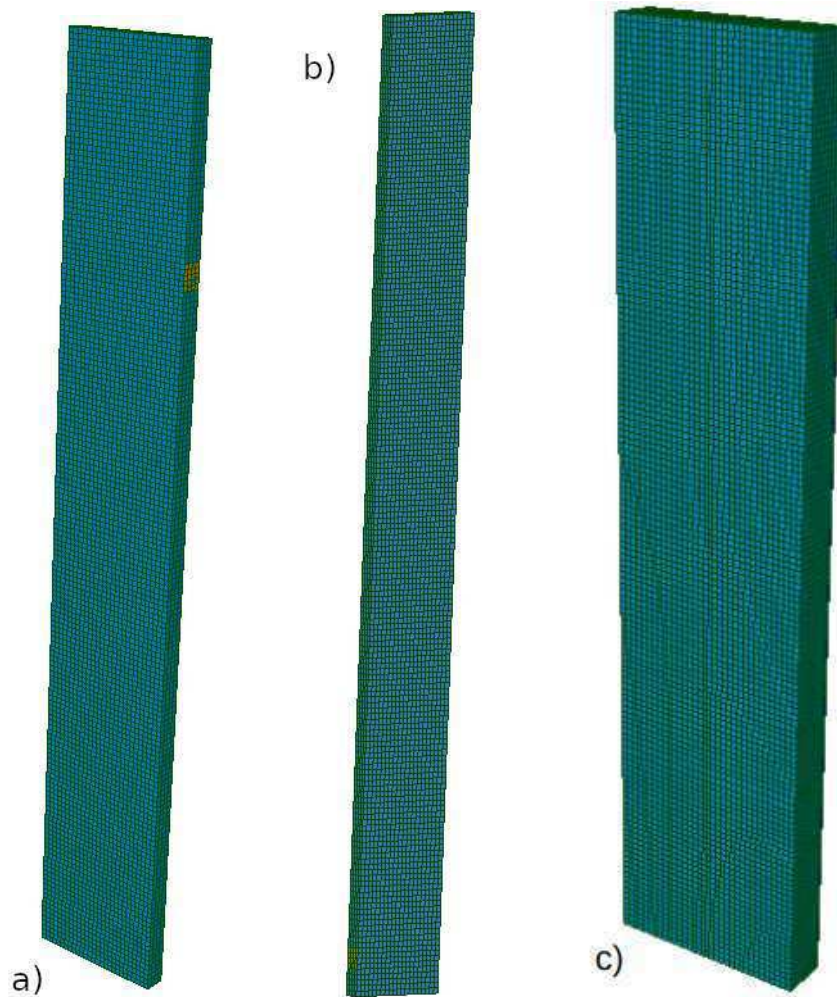


Figura 3.7 – Malhas computacionais usadas para a) a simulação 1, b) para as simulações 2-4 e c) para as simulações 5-16.

4. MODELAGEM MATEMÁTICA

Os modelos estudados nesse trabalho foram implementados no OpenFOAM-v2012, um programa “*Open-Source*”. Aproveitando-se dessa característica, modificou-se o “*solver reactingParcelFoam*”, que é usado para resolver problemas transientes com escoamento compressível, turbulento, com reação química, com partículas multifásicas e modelos de

filme na superfície, adicionando em seu código o modelo DPM, de modo a considerar os efeitos da fração volumétrica das partículas na fase contínua, além de inserir as colisões entre as partículas e entre as partículas e as paredes, deixando assim o *solver* com um acoplamento de 4 vias. Posteriormente, ainda implementou-se no código fonte da ferramenta, os submodelos das cinéticas de reações heterogêneas da pirólise.

Com base na abordagem Euleriana-Lagrangiana e nas características particulares de um escoamento gás-partícula no processo de pirólise de biomassa em leito fluidizado/jorro, foram adotados as seguintes considerações:

- Regime transiente, com o passo de tempo variável a partir do número de Courant $\left(C_o = \frac{|u|\Delta t}{\Delta x}\right)$ máximo fixo em 0,5;
- Escoamento multifásico composto por uma fase contínua e uma fase discreta;
- Ocorre transferência de massa, quantidade de movimento e energia entre as fases.
- Acoplamento de 4 vias;
- A fase discreta é composta por partículas esféricas multicomponente;
- A fase gasosa é um composto multicomponente.
- O escoamento da fase gasosa é turbulento (Modelo $\kappa - \varepsilon$);
- A fase gasosa foi tratada como um fluido compressível;
- A fase gasosa foi modelado como gás ideal;
- Efeito da radiação (Modelo P1);
- Reação química homogênea e heterogênea;
- Encolhimento das partículas;
- Não foi utilizado o conceito de partícula representativa;

4.1. Equações Governantes

A partir das considerações apresentadas para a modelagem, as equações governantes da fase gasosa representada pela abordagem euleriana e as equações governantes da fase particulada, na qual se fez o uso do modelo DPM, estão apresentados na Tabela 3.3. Um maior detalhamento dessas equações é encontrado na seção 5. do capítulo 2.

Tabela 3.3 – Equações governantes.

Equações Governantes			
1.	Balanco de Massa		
1.1	Fase Fluida	$\frac{\partial (\alpha_g \rho_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g) = \chi_{gp}$	(T3-1)
1.2	Fase Sólida	$\frac{dm_i}{dt} = \chi_i^{g-p}$	(T3-2)
2.	Balanco da Quant. Movimento		
2.1.	Fase Fluida	$\frac{\partial (\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g) = -\alpha_g \nabla p_g + \rho_g \alpha_g \mathbf{g} + \nabla \cdot (\alpha_g \boldsymbol{\tau}_g) + \mathbf{F}_{gp}$	(T3-3)
2.2.	Fase Sólida	$m_i \frac{d\mathbf{u}_i}{dt} = m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = f_i^{g-p} + \sum f_{i,j}^{p-p} + f_i^{p-w} + f_i^{grav}$	(T3-4)
2.3.	Fase Sólida	$I_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \sum \mathbf{M}_{i,j}^{p-p} + \mathbf{M}_i^{p-w} + \mathbf{M}_i^{f-p}$	(T3-5)
3.	Balanco de Energia		
3.1	Fase Fluida	$\frac{\partial (\alpha_g \rho_g c_{pg} T_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g c_{pg} T_g) = \nabla \cdot (\alpha_g k_g \nabla T_g) + Q_{gp} + Q_{r,g} + Q_{rad}$	(T3-6)
3.2	Fase Sólida	$m_i c_{pp,i} \frac{dT_i}{dt} = Q_i^{g-p} + Q_i^{rad} + Q_{ri}^{g-p}$	(T3-7)
4.	Balanco de Esp. Química		
4.1	Fase Fluida	$\frac{\partial (\alpha_g \rho_g Y_g^k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g Y_g^k) = \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g D_{i,f,g}^k \nabla Y_g^k) + \chi_g^k + E_{gp}^k$	(T3-8)
4.2	Fase Sólida	$\frac{d(m_i Y_{p,i}^k)}{dt} = \chi_{i,k}^{g-p}$	(T3-9)

4.2. Equações de Fechamento

A dificuldade de modelar um escoamento multifásico está na escolha dos modelos que representam o comportamento das interfaces que separam as diferentes fases, pois essas podem ser múltiplas, deformáveis e móveis, o que origina uma descontinuidade nos valores das propriedades físicas dos fluidos, causando um escoamento bastante complexo em suas vizinhanças. Portanto, as escolhas dessas equações são de fundamental importância para uma boa representação dos fenômenos envolvidos. Para a presente pesquisa, foram utilizadas as equações apresentadas na Tabela 3.4. Um maior detalhamento desses modelos podem ser encontrados na seção 5. do capítulo 2.

Tabela 3.4 – Equações de Fechamento.

Equações de Fechamento			
1.	Balanço de Massa		
1.1.	Cinética de Reação	$\chi_i^{g-p} = \sum_{k=1}^{N_k} \chi_{i,k}^{g-p}$	(T4-1)
2.	Balanço de Quant. Movimento		
2.1.	Força de Arraste	Gidaspow	(T4-2)
2.2.	Força da Gravidade	$\vec{f}_i^{grav} = \rho_i V_{p,i} \mathbf{g}$	(T4-3)
2.3.	Colisões	<i>pairSpringSliderDashpot</i>	(T4-4)
3.	Balanço de Energia		
3.1.	Gás-sólido	$Q_i^{g-p} = \frac{k_g N_{u,p}}{d_p} A_{p,i} (T_g - T_p)$	(T4-5)
		$N_{u,p} = 2 + 0.6 R_{e,s}^{0.5} P_r^{0.33}$	
3.2.	Radiação	$Q_{rad} = \sigma \varepsilon_i A_i (T_{se,i}^4 - T_i^4)$	(T4-6)
3.3.	Reação	$Q_{r,i}^{g-p} = A_{p,i} \chi_i \Delta H_p$	(T4-7)
4.	Balanço de Esp. Química		
4.1.	Reação Homogênea	$\chi_g^k = \Theta_i e^{\frac{-E_a}{RT}} C_i^a$	(T4-8)
4.2.	Reação Heterogênea	$\chi_{i,k}^{g-p} = \pm \psi_k m_{i,k}$	(T4-9)

4.3. Cinética da Reação de Pirólise

O processo de pirólise rápida da biomassa é extremamente complexo e pode envolver centenas de espécies e reações químicas. Como os detalhes da cinética ainda são des-

conhecidos, esquemas de desvolatilização global derivados de experimentos TGA (“*thermogravimetric analysis*”) são frequentemente usados para obter modelos cinéticos para simular a pirólise rápida da biomassa. Para tanto, reagentes e produtos são agrupados e conectados por meio de várias reações simplificadas (Xiong et al., 2014).

Nesta pesquisa foram utilizados dois esquemas cinéticos obtidos a partir esquemas de desvolatilização global. O primeiro é o mecanismo de reação para um esquema semiglobal de dois estágios e o segundo é o mecanismo de reação para um esquema multicomponentes e multiestágios. Eles serão apresentados a seguir.

4.3.1. Mecanismo Semiglobal de Dois Estágios

O mecanismo da reação para um esquema semiglobal de dois estágios está ilustrado na Figura 3.8. Nele, a biomassa representada pela madeira é decomposta em biocarvão, em biogás e em vapor de bio-óleo a partir de três reações distintas. Nesse mecanismo existe uma reação secundária que consome o vapor de bio-óleo gerado e produz o biogás e o biocarvão. Esse mecanismo foi utilizado no trabalho desenvolvido por Papadikis et al. (2009c).

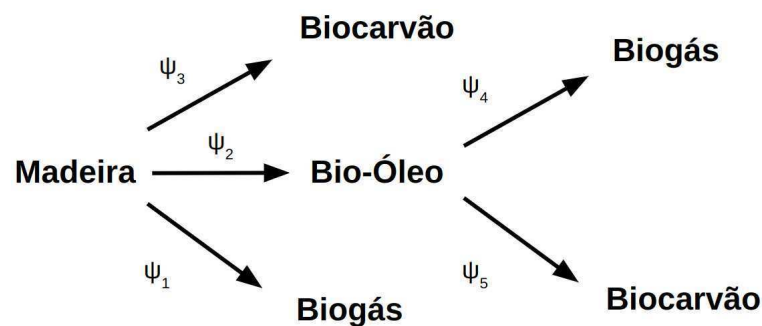


Figura 3.8 – Mecanismo de reação semiglobal de dois estágios.

Fonte: Adaptado de Papadikis et al. (2009c).

As taxas das reações do mecanismo semiglobal de dois estágio foram calculadas a partir da equação de Arrhenius definida por:

$$\psi_i = \Theta_i e^{\frac{-E_{ai}}{RT}} \quad (3.1)$$

onde ψ_i é a constante da reação i [s^{-1}], Θ_i é o fator pré-exponencial da reação i [s^{-1}], E_{ai} é a energia de ativação da reação i em [J/mol], R é a constante universal dos gases ($8,314 J/mol K$) e T é a temperatura de reação. Os valores dos parâmetros cinéticos foram

obtidos no trabalho realizado por Chan et al. (1985) e estão disponíveis na Tabela 3.5. Para a reação homogênea que transforma o bio-óleo em biogás foi adotada uma cinética de primeira ordem. A reação é exotérmica e seu ΔH é -255kJ/kg.

Tabela 3.5 – Parâmetros de Arrhenius para a reação semiglobal de dois estágios.

	$\Theta_i [s^{-1}]$	$E_{ai} [kJ/mol]$
Reação 1	$1,30 \times 10^8$	$1,40 \times 10^8$
Reação 2	$2,00 \times 10^8$	$1,33 \times 10^8$
Reação 3	$1,08 \times 10^7$	$1,21 \times 10^8$
Reação 4	$1,48 \times 10^6$	$1,44 \times 10^8$
Reação 5	$1,48 \times 10^6$	$1,44 \times 10^8$

Fonte: Chan et al. (1985).

4.3.2. Mecanismo Multicomponentes e Multiestágios

O mecanismo de reação para o esquema multicomponentes e multiestágios foi proposto por Koufopoulos et al. (1989), Di Blasi (1994), Ward and Braslaw (1985) e Miller and Bellan (1997). Este modelo correlaciona a taxa de pirólise da biomassa com sua composição:

$$\text{Biomassa} = Y_{p,i}^c \text{Celulose} + Y_{p,i}^h \text{Hemicelulose} + Y_{p,i}^l \text{Lignina} \quad (3.2)$$

Nesse modelo a taxa de reação da biomassa é considerada como sendo a soma das taxas de reações dos principais componentes: celulose, hemicelulose e lignina. Portanto, cada componente tem um peso na contribuição para a formação da biomassa virgem (Xue et al., 2012). Essa afirmação assume que as possíveis interações entre os componentes da biomassa têm um efeito insignificante no curso da pirólise. Com isso, qualquer matéria-prima de biomassa pode ser modelada a partir do conhecimento da composição inicial de celulose, hemicelulose e lignina. O mecanismo dessa reação está ilustrado na Figura 3.9.

Conforme apresentado na Figura 3.9, os produtos são agrupados em três grupos: biocarvão, biogás e vapor de bio-óleo. Λ é a razão de formação para o componente do biocarvão. Todas as reações são modeladas a partir da equação Arrhenius (Equação 3.1). Para a reação homogênea que transforma o bio-óleo em biogás foi adotada uma cinética de primeira ordem.

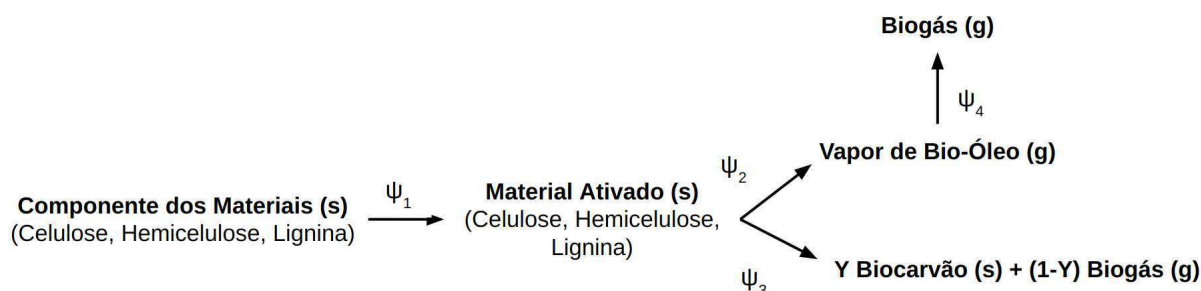


Figura 3.9 – Mecanismo de reação de vários componentes e vários estágios.

Fonte: Adaptado de Xue et al. (2012).

Segundo Di Blasi (1994), Koufopoulos et al. (1991), Curtis and Miller (1988), as entalpias das reações foram obtidas a partir de medições realizadas apenas para a celulose, no entanto, esses valores também são usados para o cálculo da hemicelulose e lignina. Di Blasi (1994) afirma que a primeira reação (ψ_1) da biomassa virgem para os componentes ativos tem liberação de calor muito pequeno, podendo ser desprezado. Koufopoulos et al. (1991) relatam que a reação de formação do vapor bio-óleo (ψ_2) é endotérmica e, tanto a formação do biocarvão e do biogás (ψ_3), quanto o craqueamento secundário do vapor bio-óleo (ψ_4) são exotérmicas. Os parâmetros cinéticos e as entalpias de reação estão disponíveis na Tabela 3.6.

Tabela 3.6 – Parâmetros de Arrhenius para o esquema multicomponente.

Componentes	Reações	Λ de ψ_3 []	Θ_i [s^{-1}]	E_{ai} [J/mol]	ΔH_r [J/kg]
Celulose ^a	$\psi_{c,1}$	-	$2,80 \times 10^{19}$	$2,424 \times 10^5$	0
	$\psi_{c,2}$	-	$3,28 \times 10^{14}$	$1,965 \times 10^5$	$2,55 \times 10^5$
	$\psi_{c,3}$	$(\Lambda_c) 0,35$	$1,30 \times 10^{10}$	$1,505 \times 10^5$	$-2,55 \times 10^5$
Hemicelulose ^b	$\psi_{h,1}$	-	$2,10 \times 10^{16}$	$1,867 \times 10^5$	0
	$\psi_{h,2}$	-	$8,75 \times 10^{15}$	$2,024 \times 10^5$	$2,55 \times 10^5$
	$\psi_{h,3}$	$(\Lambda_h) 0,60$	$2,60 \times 10^{11}$	$1,457 \times 10^5$	$-2,55 \times 10^5$
Lignina ^b	$\psi_{l,1}$	-	$9,60 \times 10^8$	$1,076 \times 10^5$	0
	$\psi_{l,2}$	-	$1,50 \times 10^9$	$1,438 \times 10^5$	$2,55 \times 10^5$
	$\psi_{l,3}$	$(\Lambda_l) 0,75$	$7,70 \times 10^6$	$1,114 \times 10^5$	$-2,55 \times 10^5$
Bio-Óleo ^c	$\psi_{bo,4}$	-	$4,28 \times 10^6$	$1,080 \times 10^5$	$-4,2 \times 10^4$

Fonte: a) Bradbury et al. (1979), b) Miller and Bellan (1997) e c) Liden et al. (1988).

5. PROPRIEDADE DOS MATERIAIS

Para estudos em fluidodinâmica computacional, faz-se necessário o conhecimento das propriedades físicas dos materiais de cada uma das fases envolvidas. Portanto, está apresentado na Tabela 3.7, as propriedades de todos os materiais usados no desenvolvimento desta pesquisa.

Tabela 3.7 – Propriedades dos materiais usados no desenvolvimento do trabalho.

	ρ [kg/m ³]	μ [Pa s]	k [W/mK]	Cp [J/kg K]	ε_p []
Madeira ^a	700	-	0,12	1500	0,9
Carvalho Vermelho ^d	630	-	0,177	2000	0,9
Cana-de-Açúcar ^b	120	-	0,1	2468	0,9
Celulose Pura ^c	400	-	0,3	2300	0,9
Biogás ^c	Gás ideal ¹	3×10^{-5}	$2,577 \times 10^{-2}$	1100	0
Bio-Óleo ^c	Gás ideal ¹	3×10^{-5}	$2,577 \times 10^{-2}$	2500	0
Nitrogênio ^c	Gás ideal ¹	3×10^{-5}	$3,58 \times 10^{-2}$	1121	0
Ar ^e	Gás ideal	$1,72 \times 10^{-5}$	0,03	1012	0
Biocarvão ^a (madeira)	490	-	0,071	670	0,9
Biocarvão ^c	2333	-	0,1	1100	0,9
Vidro ^c	2649	-	0,27	800	0,6

Fonte: a) Papadikis et al. (2009c), b) Almeida (2008), c) Yang et al. (2021b), d) Çavuş et al. (2019) e e) Bergman and Lavine (2017)

[1] - Equação de estado para gás ideal ($PV=nRT$)

6. CONDIÇÕES INICIAIS E DE CONTORNO

Como apresentado na seção 4., as equações que regem o comportamento da pirólise de biomassa são equações diferenciais, portanto necessitam da especificação das condições de contorno e das condições iniciais para poderem ser resolvidas. São apresentadas a seguir as condições usadas para modelar os problemas apresentados na Tabela 3.1.

- Condição inicial e de contorno para a simulação 1

(1) Inicial:

- Velocidade do fluido no interior do reator é 0 m/s;
- Pressão manométrica no interior do reator é 0 Pa;
- Temperatura no interior do reator é 500 °C;
- Fração mássica de N₂ é 1;
- Fração mássica do biogás é 0;
- Fração mássica do vapor de bio-óleo é 0;
- Produção de energia cinética turbulenta é calculada por $\kappa = \frac{2}{3} (U_{ref} \Upsilon)^2$;
- Dissipação de energia cinética turbulenta é calculada por $\varepsilon = C_\mu^{3/4} \frac{\kappa^{3/2}}{0,07L}$, em que $C_\mu = 0.09$;
- A viscosidade turbulenta é 0;
- Temperatura inicial da partícula foi de 30 °C;
- A velocidade inicial da partícula foi de 0 m/s;
- O diâmetro inicial da partícula foi de 0.0005 m;
- A partícula inicialmente foi inserida no reator na posição (0 0,003 0,04);
- A partícula de biomassa foi considerada apenas como sólida, formada apenas de madeira;

(2) Entrada:

- O fluido entra com uma velocidade de 1,2 m/s na direção z;
- O gradiente de pressão é nulo;
- Temperatura de entrada do gás é de 500 °C;
- Fração mássica de N₂ é 1;
- Fração mássica do biogás é 0;
- Fração mássica do vapor de bio-óleo é 0;
- A produção da energia cinética turbulenta calculada por $\kappa = \frac{2}{3} (U_{ref} \Upsilon)^2$;
- A dissipação da energia cinética turbulenta é calculada por $\varepsilon = C_\mu^{3/4} \frac{\kappa^{3/2}}{0,07L}$, em que $C_\mu = 0.09$;

(3) Saída:

- O gradiente de velocidade é nulo;
- A pressão manométrica é 0;
- O gradiente de temperatura é nulo;

- Fração mássica de N_2 é gradiente nulo;
- Fração mássica do biogás é gradiente nulo;
- Fração mássica do vapor de bio-óleo é gradiente nulo;
- O gradiente de κ é nulo;
- O gradiente de ε é nulo;

(4) Parede:

- Não possui deslizamento;
- O gradiente da pressão é nula;
- A temperatura na parede é adiabática;
- Fração mássica de N_2 é gradiente nulo;
- Fração mássica do biogás é gradiente nulo;
- Fração mássica do vapor de bio-óleo é gradiente nulo;
- *kqRWallFunction* como função de parede de κ ;
- *epsilonWallFunction* como função de parede de ε ;
- *nutLowReWallFunction* como função de parede para ν_t ;

- Condições iniciais e de contorno para as simulações 2 - 4

(1) Inicial:

- Velocidade do fluido no interior do reator é 0 m/s;
- Pressão manométrica no interior do reator é 0 Pa;
- Temperatura no interior do reator é 500 °C;
- Fração mássica de N_2 é 1;
- Fração mássica do biogás é 0;
- Fração mássica do vapor de bio-óleo é 0;
- Produção de energia cinética turbulenta é calculada por $\kappa = \frac{2}{3} (U_{ref} \Upsilon)^2$;
- Dissipação de energia cinética turbulenta é calculada por $\varepsilon = C_\mu^{3/4} \frac{\kappa^{3/2}}{0,07L}$, em que $C_\mu = 0.09$;
- A viscosidade turbulenta é 0;
- Temperatura inicial da partícula foi de 27 °C;
- A velocidade inicial da partícula foi de 0 m/s;
- O diâmetro inicial da partícula foi de 0,00005m (celulose pura), 0,00025 (carvalho vermelho) e 0,0005m (cana-de-açúcar);

- A partícula inicialmente foi inserida no reator na posição (0,01905 0,0025 0,0135);
- Foram realizadas simulações com as diferentes composições das biomassas apresentadas na Tabela 3.8;

Tabela 3.8 – Composição das biomassas estudadas.

	Celulose ^a	Carvalho Vermelho ^a	Bagaço (cana-de-açúcar) ^b
Celulose	1,0	0,41	0,43
Hemicelulose	0,0	0,32	0,34
Lignina	0,0	0,27	0,23

Fonte: a) Xue et al. (2012), b) Almeida (2008)

No presente estudo, bem como nos estudos de Xue et al. (2012) e Almeida (2008), a composição da celulose pura, do carvalho vermelho e do bagaço da cana-de-açúcar foi considerada levando em conta uma biomassa seca, livre de proteínas vegetais, sem extrativos (principalmente óleos vegetais), sem minerais e sem cinzas.

(2) Entrada:

- O fluido entra com uma velocidade na direção z de 0,36 m/s (celulose pura), de 0,26 m/s (carvalho vermelho) e de 0,21 m/s (bagaço da cana-de-açúcar);
- O gradiente de pressão é nulo;
- Temperatura de entrada do gás é de 500 °C;
- Fração mássica de N₂ é 1;
- Fração mássica do biogás é 0;
- Fração mássica do vapor de bio-óleo é 0;
- Produção de energia cinética turbulenta é calculada por $\kappa = \frac{2}{3} (U_{ref} \Upsilon)^2$;
- Dissipação de energia cinética turbulenta é calculada por $\varepsilon = C_\mu^{3/4} \frac{\kappa^{3/2}}{0,07L}$, em que $C_\mu = 0.09$;

(3) Saída:

- O gradiente de velocidade é nulo;
- A pressão manométrica é 0;
- O gradiente de temperatura é nulo;
- Fração mássica de N₂ é gradiente nulo;

- Fração mássica do biogás é gradiente nulo;
- Fração mássica do vapor de bio-óleo é gradiente nulo;
- O gradiente de κ é nulo;
- O gradiente de ε é nulo;

(4) Parede:

- Não possui deslizamento;
- O gradiente da pressão é nula;
- A temperatura na parede é adiabática;
- Fração mássica de N_2 é gradiente nulo;
- Fração mássica do biogás é gradiente nulo;
- Fração mássica do vapor de bio-óleo é gradiente nulo;
- *kqRWallFunction* como função de parede de κ ;
- *epsilonWallFunction* como função de parede de ε ;
- *nutLowReWallFunction* como função de parede para ν_t ;

- Condição inicial e de contorno para a simulação 5

(1) Inicial:

- Velocidade do fluido no interior do reator é 0 m/s;
- Pressão manométrica no interior do reator é 0 Pa;
- Temperatura no interior do reator é 30 °C;
- Fração mássica de ar é 1;
- Fração mássica do biogás é 0;
- Fração mássica do vapor de bio-óleo é 0;
- Produção de energia cinética turbulenta é calculada por $\kappa = \frac{2}{3} (U_{ref} \Upsilon)^2$;
- Dissipação de energia cinética turbulenta é calculada por $\varepsilon = C_\mu^{3/4} \frac{\kappa^{3/2}}{0,07L}$, em que $C_\mu = 0.09$;
- A viscosidade turbulenta é 0;
- Temperatura inicial do leito de partículas inertes foi de 30 °C;
- A velocidade inicial do leito de partículas inertes foi de 0 m/s;
- O diâmetro inicial das partículas inertes foi de 0.0026 m;
- A altura do leito das partículas inertes foi de 0.1 m;

(2) Entrada:

- O fluido entra com uma velocidade de 46,9 m/s na direção z;
- O gradiente de pressão é nula;
- Temperatura de entrada do gás é de 30 °C;
- Fração mássica de ar é 1;
- Fração mássica do biogás é 0;
- Fração mássica do vapor de bio-óleo é 0;
- Produção de energia cinética turbulenta é calculada por $\kappa = \frac{2}{3} (U_{ref} \Upsilon)^2$;
- Dissipação de energia cinética turbulenta é calculada por $\varepsilon = C_\mu^{3/4} \frac{\kappa^{3/2}}{0,07L}$, em que $C_\mu = 0.09$;

(3) Saída:

- O gradiente de velocidade é nulo;
- A pressão manométrica é 0;
- O gradiente de temperatura é nulo;
- Fração mássica de ar é gradiente nulo;
- Fração mássica do biogás é gradiente nulo;
- Fração mássica do vapor de bio-óleo é gradiente nulo;
- O gradiente de κ é nulo;
- O gradiente de ε é nulo;

(5) Parede:

- Não possui deslizamento;
- O gradiente da pressão é nula;
- A temperatura na parede é adiabática;
- Fração mássica de ar é gradiente nulo;
- Fração mássica do biogás é gradiente nulo;
- Fração mássica do vapor de bio-óleo é gradiente nulo;
- *kqRWallFunction* como função de parede de κ ;
- *epsilonWallFunction* como função de parede de ε ;
- *nutLowReWallFunction* como função de parede para ν_t ;

- Condições iniciais e de contorno para as simulações 6 - 8

(1) Inicial:

- Velocidade do fluido no interior do reator é 0 m/s;
- Pressão manométrica no interior do reator é 0 Pa;
- Temperatura no interior do reator é 500 °C;
- Fração mássica de N₂ é 1;
- Fração mássica do biogás é 0;
- Fração mássica do vapor de bio-óleo é 0;
- Produção de energia cinética turbulenta é calculada por $\kappa = \frac{2}{3} (U_{ref} \Upsilon)^2$;
- Dissipação de energia cinética turbulenta é calculada por $\varepsilon = C_\mu^{3/4} \frac{\kappa^{3/2}}{0,07L}$, em que $C_\mu = 0.09$;
- A viscosidade turbulenta é 0;
- Temperatura inicial do leito de partículas inertes foi de 27 °C;
- A velocidade inicial do leito de partículas inertes foi de 0 m/s;
- O diâmetro inicial das partículas inertes foi de 0.0026 m;
- O reator contém um leito de areia com altura de 0.1 m;

(2) Entrada:

- O fluido entra com uma velocidade de 127,86 m/s na direção z;
- O gradiente de pressão é nula;
- Temperatura de entrada do gás é de 500 °C;
- Fração mássica de N₂ é 1;
- Fração mássica do biogás é 0;
- Fração mássica do vapor de bio-óleo é 0;
- Produção de energia cinética turbulenta é calculada por $\kappa = \frac{2}{3} (U_{ref} \Upsilon)^2$;
- Dissipação de energia cinética turbulenta é calculada por $\varepsilon = C_\mu^{3/4} \frac{\kappa^{3/2}}{0,07L}$, em que $C_\mu = 0.09$;

(3) Entrada da Partícula de Biomassa:

- A biomassa é uma partícula da palha da cana-de-açúcar composta por 43% de celulose, 34% de hemicelulose e 23% de lignina segundo Almeida (2008);

- A partícula entra com uma velocidade de 0,2 m/s na direção x;
- Entram 261 partículas por segundo;
- O diâmetro das partículas é de 0.0026 m;
- A temperatura das partículas é de 27 °C;

(4) Saída:

- O gradiente de velocidade é nulo;
- A pressão manométrica é 0;
- O gradiente de temperatura é nulo;
- Fração mássica de N₂ é gradiente nulo;
- Fração mássica do biogás é gradiente nulo;
- Fração mássica do vapor de bio-óleo é gradiente nulo;
- O gradiente de κ é nulo;
- O gradiente de ε é nulo;

(5) Parede:

- Não possui deslizamento;
- O gradiente da pressão é nula;
- A temperatura na parede é adiabática;
- Fração mássica de N₂ é gradiente nulo;
- Fração mássica do biogás é gradiente nulo;
- Fração mássica do vapor de bio-óleo é gradiente nulo;
- *kqRWallFunction* como função de parede de κ ;
- *epsilonWallFunction* como função de parede de ε ;
- *nutLowReWallFunction* como função de parede para ν_t ;

As simulações 9 - 16 apresentam condições de contorno e condições iniciais semelhantes aos casos 6 - 8, modificando apenas os parâmetros dos efeitos que serão discutidos na seção a seguir.

7. PLANEJAMENTO EXPERIMENTAL NUMÉRICO

Como seu próprio nome sugere, o planejamento experimental é um ramo estatístico utilizado para planejar experimentos, ou seja, uma ferramenta que define quais informações, em que quantidade e em que condições os resultados dos experimentos devem ser coletados. Ele permite que vários parâmetros de entrada dos experimentos sejam manipulados, determinando o efeito que eles possuem em uma variável de resposta especificada, e fornecem uma grande quantidade de informações sobre suas interações. Portanto, essa técnica é recomendada para estudar como um conjunto de fatores influencia o comportamento de uma variável de interesse.

Esta metodologia pode ser extrapolada e aplicada para planejar simulações numéricas e quando isso ocorre é chamado de planejamento experimental numérico. Para aplicá-la nessa pesquisa, definiu-se como variável de resposta a taxa de conversão de biomassa em produto ao fim da simulação e os parâmetros de interesse estudados foram a velocidade do gás inerte, a temperatura do gás e o diâmetro das partículas de biomassa. Foi realizado um planejamento experimental numérico do tipo 2^k com as variações dos fatores conforme apresentado na Tabela 3.9.

Tabela 3.9 – Resumo das simulações do DoE numérico.

Simulações	Cenários DoE	$U_g[m/s]$	$T_g[C]$	$d_p[m]$
09	1	142	600	$4,2 \times 10^{-3}$
10	2	142	600	$1,0 \times 10^{-3}$
11	3	142	400	$4,2 \times 10^{-3}$
12	4	142	400	$1,0 \times 10^{-3}$
13	5	112	600	$4,2 \times 10^{-3}$
14	6	112	600	$1,0 \times 10^{-3}$
15	7	112	400	$4,2 \times 10^{-3}$
16	8	112	400	$1,0 \times 10^{-3}$

Os fatores tiveram como base as condições de contorno das simulações 6-8. Adotou-se uma variação de $\pm 11\%$ em cima da velocidade de 127,86 m/s, uma variação de $\pm 100^\circ\text{C}$ sobre a temperatura de 500°C e um variação de $\pm 1,6 \times 10^{-3}$ sobre o diâmetro de partícula de $2,6 \times 10^{-3}$.

8. MODELAGEM NUMÉRICA

O OpenFOAM resolve o conjunto das equações de balanço com as equações de fechamento pelo método de volumes finitos. Essa abordagem requer o uso de métodos de discretização para converter as equações diferenciais parciais em um conjunto de equações algébricas. A Tabela 3.10 apresenta os métodos de discretização usados neste trabalho.

Tabela 3.10 – Métodos das discretizações.

	Termo da Equação	Métodos
1.	Transiente	
	Todos os termos	<i>CrankNicolson 0.7</i>
2.	Gradiente	
	$\nabla \mathbf{u}_g$	<i>cellMDLimited Gauss linear 1.0</i>
	Demais termos	<i>cellMDLimited Gauss linear 0.5</i>
3.	Laplaciano	
	Todos os termos	<i>Gauss linear orthogonal</i>
4.	Divergente	
	$\nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g)$	<i>Gauss linearUpwind grad(U)</i>
	$\nabla \cdot (\alpha_g p_g), \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g h_g)$	<i>Gauss linearUpwind</i>
	$\nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g \varepsilon_g), \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g \kappa_g)$	<i>Gauss linearUpwind default</i>
	$\nabla \cdot (\alpha_g \tau_g)$	<i>Gauss linear</i>
	$\nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g Y_{i,g})$	<i>Gauss vanLeer</i>
5.	Interpolação	
	Todos os termos	<i>linear</i>
6.	Gradiente da face	
	Todos os termos	<i>orthogonal</i>

O resultado da discretização é um conjunto de equações algébricas que são construídas da forma $\mathbf{A}[\phi] = b$. Neste sistema, os coeficientes das variáveis desconhecidas que constituem a matriz \mathbf{A} são resultados do procedimento de linearização das informações contidas na malha computacional, enquanto que o vetor b contém todos os termos fontes, o que incluem constantes, condições de contorno e componentes não linearizáveis. As técnicas de resolução desse sistema algébrico não dependem do método de discretização

usado, existindo uma variedade de opções que podem ser utilizados. Foram utilizados os métodos de resolução de matrizes apresentados na Tabela 3.11.

Tabela 3.11 – Métodos da resolução dos sistemas de matrizes.

Equações Discretizadas	Método	Pré-Condicionador	Tolerância
G	PCG	DIC	1×10^{-7}
p_g	GAMG	GaussSeidel	1×10^{-7}
$U_g, \kappa_g, \epsilon_g$	PBiCGStab	DILU	1×10^{-7}
$Y_{i,g}, h_g$	PBiCGStab	DILU	1×10^{-10}

A equação de Navier Stokes apresenta a pressão e a velocidade nas três direções como incógnitas a serem encontradas. Ao decompor vetorialmente essa equação, têm-se quatro variáveis (P, u, v e w) para três equações e, portanto, tem-se um sistema de equação impossível de ser resolvido. Para contornar esse problema, adiciona-se a equação da continuidade nas equações a serem resolvidas, passando a ter agora quatro equações para encontrar quatro variáveis. O acoplamento destas equações é realizada por meio de algoritmos de acoplamento pressão-velocidade. Nesse trabalho foi utilizado um algoritmo híbrido baseado nos algoritmos PISO e SIMPLE, chamado de PIMPLE, ele consiste em obter a solução correta de um problema de transporte de quantidade de movimento quando o campo de pressões introduzido nas equações de Navier-Stokes gerar velocidades que satisfaçam a equação da continuidade. Esse algoritmo foi adotado seguindo a recomendação de Xiong et al. (2013b). De acordo com os autores, esse algoritmo permite passos de tempo relativamente grandes, mantendo a estabilidade numérica e evitando o efeito conhecido como checkerboard na pressão. Os parâmetros desse algoritmo são apresentados na Tabela 3.12.

Tabela 3.12 – Parâmetros do acoplamento pressão-velocidade - PIMPLE.

Acoplamento Pressão-Velocidade - PIMPLE	
$nOuterCorrectors$	2
$nCorrectors$	3
$momentumPredictor$	yes
$nNonOrthogonalCorrectors$	1

Capítulo 4

Resultados

Neste capítulo são apresentados os resultados das simulações propostas a partir do equacionamento apresentado no capítulo anterior. Inicialmente são discutidos os resultados referentes as simulações 1 - 5, no qual o objetivo é validar o modelo proposto para a pirólise de biomassa. Em seguida, são avaliados os resultados das simulações referente a posição de entrada da biomassa em um leito de jorro (simulações 6 - 8) e as variações dos parâmetros operacionais segundo o planejamento experimental numérico realizado (simulações 9 - 16). Por fim, discutiu-se os comportamentos físicos presente na pirólise do leito de jorro da simulação com o maior valor de conversão da biomassa da cana-de-açúcar.

1. VALIDAÇÃO DOS MODELOS

1.1. Simulação com a Cinética Semiglobal de Dois Estágios

Durante o processo de pirólise, as partículas de biomassa são aquecidas em uma atmosfera inerte, dando início as reações químicas. No caso de uma única partícula, o fenômeno físico é o mesmo. Para verificar se os modelos de transferência de calor e massa adotados descrevem a física da pirólise, plotou-se os comportamentos da temperatura, da variação da massa, da mudança de densidade e os rendimentos da reação para a biomassa, biocarvão, biogás e o vapor de bio-óleo em função do tempo. Todos esses resultados foram comparados com os comportamentos obtidos por Papadikis et al. (2009c) e são apresentados a seguir.

1.1.1. Temperatura na Superfície da Partícula

O modelo usado por Papadikis et al. (2009c) para representar o comportamento da partícula de biomassa está apresentado na Equação 4.1.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho c_{pp,i} T_i) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(k_p r^2 \frac{\partial T_i}{\partial r} \right) \quad (4.1)$$

Para usar esse modelo, existe a necessidade de se realizar a discretização da partícula ao longo do seu raio, portanto, ele é capaz de obter a temperatura da biomassa em cada ponto discretizado. Ainda analisando a Equação 4.1, observa-se que a condutividade térmica da partícula varia com o raio, fazendo com que ela seja função da temperatura, o que deixa o modelo ainda mais preciso.

Já o modelo usado nesta tese está apresentado na Equação T3-7 do Capítulo 3. Esse modelo considera que a resistência térmica interna da partícula é desprezível e a temperatura é uniforme em toda a partícula. Essa condição é uma aproximação e não representa fielmente a realidade da transferência de calor na biomassa, uma vez que a superfície da partícula é aquecida mais rapidamente e o calor é conduzido ao longo do raio da partícula. Segundo Norouzi et al. (2019), essa suposição é recomendada para partículas muito pequenas com número de Biot $< 0,1$. Esse parâmetro é calculado por $B_i = hL_{c,p}/k_b$, onde $L_{c,p}$ é o comprimento característico dado pela equação $L_{c,p} = V_{p,i}/A_{p,i}$, h é coeficiente de convecção dada pela equação $h = (2 + 0.6Re_p^{0.5}Pr^{0.33})k_g/d_p$ e k_b é a condutividade da biomassa apresentada na Tabela 3.7. Re_p e Pr na equação do h são os números adimensionais de Reynolds de partícula e Prandtl, respectivamente. Portanto, calculou-se esse valor para a simulação conforme apresentado na Tabela 4.1.

Tabela 4.1 – Número de Biot para a simulação 1

Re_p []	Pr []	h [W/m^2K]	L_c [m]	k_b [W/mK]	Bi []
8,23	0,715	398,55	$8,33 \times 10^{-5}$	0,12	0,28

É observado na Tabela 4.1 que o número de Biot é um pouco maior que o valor recomendado. Diante dessa pequena diferença obtida, da impossibilidade de alterar o diâmetro e a condutividade da partícula, o que inviabilizaria a comparação com Papadikis et al. (2009c), e do esforço computacional requerido para simular a pirólise de biomassa na presença de um leito de partículas inertes, optou-se por utilizar a Equação T3-7 ao

invés da Equação 4.1, de modo a assumir a consideração de modelar a partícula com temperatura e condutividade térmica uniforme.

Diante do apresentado, realizou-se a simulação da pirólise de madeira pela cinética semiglobal de dois estágios e comparou-se a temperatura obtida da partícula com a temperatura da superfície da partícula reportada por Papadikis et al. (2009c) dentro de intervalo de confiança de 95%, conforme o apresentado na Figura 4.1. Essa comparação é válida, pois ambos os modelos devem apresentar resultados semelhantes na superfície.

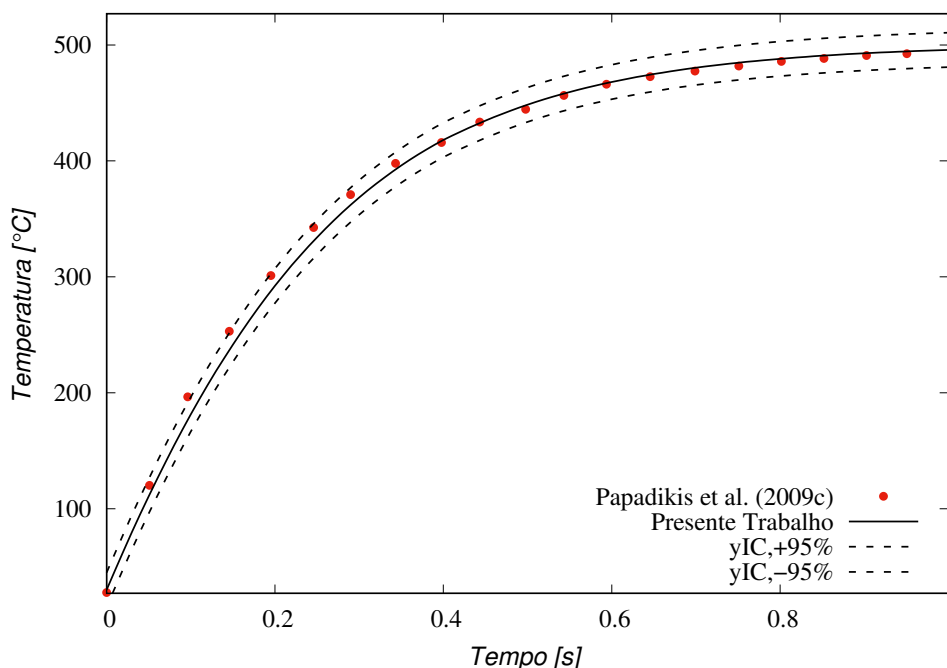


Figura 4.1 – Comportamento da temperatura na superfície da partícula durante a pirólise.

Ao confrontar o comportamento da temperatura obtida pela simulação com o resultado do comportamento da temperatura na superfície da partícula relatado por Papadikis et al. (2009c), observamos que os resultados da literatura permaneceram dentro do intervalo de confiança de 95%, indicando uma boa concordância entre os dados, confirmando estatisticamente que o modelo sugerido pela presente pesquisa conseguiu capturar bem a transferência de calor entre o fluido e a superfície da partícula.

Ao analisar o comportamento da temperatura, observa-se que ele descreve uma pirólise do tipo flash, segundo a definição de Batista Junior (2017), no qual sugere uma taxa de aquecimento muito acima dos $100^{\circ}\text{C}/\text{s}$. A partícula de biomassa inicia o processo com uma temperatura inicial de 27°C e chega na temperatura da atmosfera inerte de 500°C em apenas 1 segundo, uma taxa de aquecimento de $473^{\circ}\text{C}/\text{s}$. Depois desse tempo,

a temperatura permanece em equilíbrio com o meio até a partícula ser arrastada para fora do reator de leito fluidizado.

1.1.2. Massa da Partícula

Durante a pirólise, as grandes e complexas cadeias de hidrocarbonetos vão se decompondo em moléculas relativamente menores e mais simples, formando o vapor de bio-óleo, o biogás e o biocarvão. O vapor de bio-óleo e o biogás quando são formados se desprendem da biomassa em forma de vapor, enquanto que a partícula sólida se transforma em biocarvão, se juntando a composição de biomassa não reagida. Durante esse processo a massa da partícula sofre variação.

Os resultados apresentados na Figura 4.2 indicam que o comportamento da massa da partícula obtido por este trabalho se assemelha ao comportamento relatado por Papadikis et al. (2009c), pois observa-se que os dados de literatura permaneceram dentro de intervalo de confiança de 95%. Nos primeiros 0,5 segundos, a partícula está sendo aquecida e portanto as reações de pirólise ainda estão se iniciando, por isso não se observam grandes variações na massa. Após esse tempo, é possível observar a queda da massa em razão do aumento reacional na partícula, isso é devido ao efeito da temperatura que impulsionou as reações químicas.

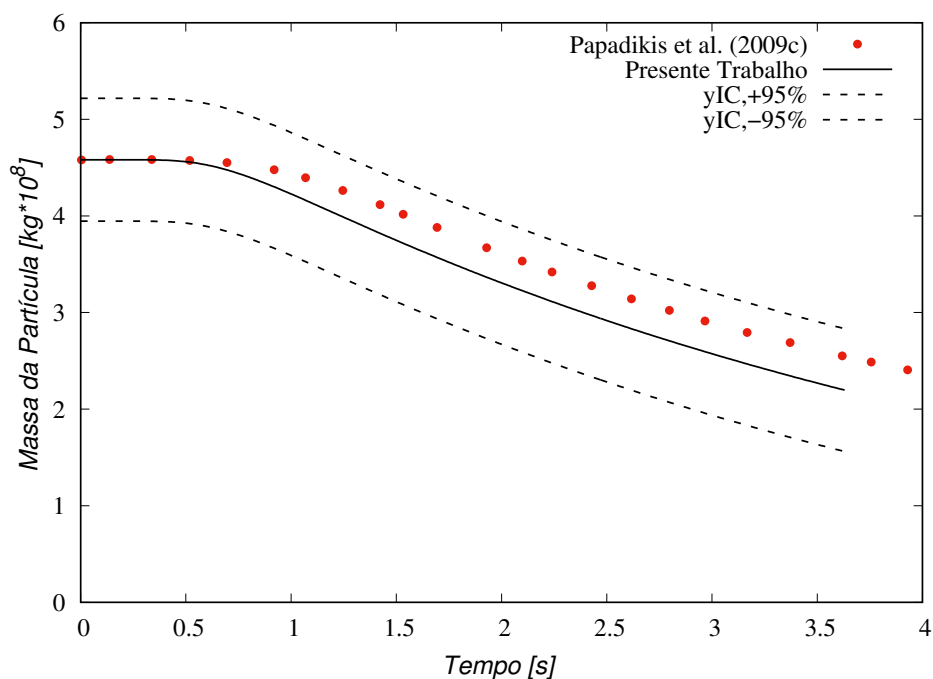


Figura 4.2 – Comportamento da massa da partícula durante a pirólise.

Ainda pode-se observar na Figura 4.2, o efeito que o modelo térmico causa no comportamento da massa da partícula. No resultado obtido pelo presente trabalho, a biomassa é consumida mais rapidamente que os dados reportados por Papadikis et al. (2009c), isso ocorre devido a consideração que a partícula apresenta uma temperatura e uma condutividade uniforme ao longo do seu raio, promovendo como consequência, uma reação também uniforme em cada ponto da partícula. Por outro lado, o modelo térmico utilizado por Papadikis et al. (2009c) proporciona que a reação ocorra de forma mais rápida na superfície e mais lenta no centro da partícula, o que diminui o consumo da biomassa e consequentemente ocorre uma perda de massa mais lenta.

Ao comparar o presente trabalho com o desenvolvido por Papadikis et al. (2009c), nota-se que a partícula de biomassa é carregada para fora do reator em diferentes tempos. Neste estudo, a partícula sai do reator em 3,63 segundos com uma massa $2,19 \times 10^{-8}$ kg, enquanto a partícula de Papadikis et al. (2009c) sai em 3,93 segundos com uma massa de $2,41 \times 10^{-8}$ kg. A diferença entre as massas apresentaram uma discrepância de 9,13%. A seguir é discutido com mais detalhes o tempo de residência da partícula no reator.

1.1.3. Dinâmica da Partícula

A partícula foi inserida no reator no tempo inicial de 0 segundos com uma velocidade nula e na altura de 0,04 m. A aceleração da gravidade, ao atuar junto da massa da partícula ainda não reagida, faz com que a força peso seja maior que a força de arraste, o que ocasiona a deposição da partícula no fundo do reator. Desde a entrada no reator, a partícula de biomassa está sendo aquecida devido ao contato direto com o gás inerte, levando aproximadamente 1 segundo para atingir a temperatura do meio. Nesse momento, a decomposição das cadeias de hidrocarbonetos se torna mais intensa, o que resulta no aumento da produção de biogás, vapor de bio-óleo e biocarvão. Essa reação ocasiona a redução da massa da partícula, alterando o equilíbrio de forças que está atuando sobre ela, e aos poucos a força peso vai se enfraquecendo frente a força de arraste e no momento em que ela é menor, a partícula começa a ser deslocada para fora do reator, como pode ser observado na Figura 4.3.

O comportamento observado na Figura 4.3 se assemelha ao comportamento reportado por Papadikis et al. (2009c). No entanto, a partícula usada na presente pesquisa é carregada para fora do reator no tempo de 3,63 segundos, enquanto a partícula de Papadi-

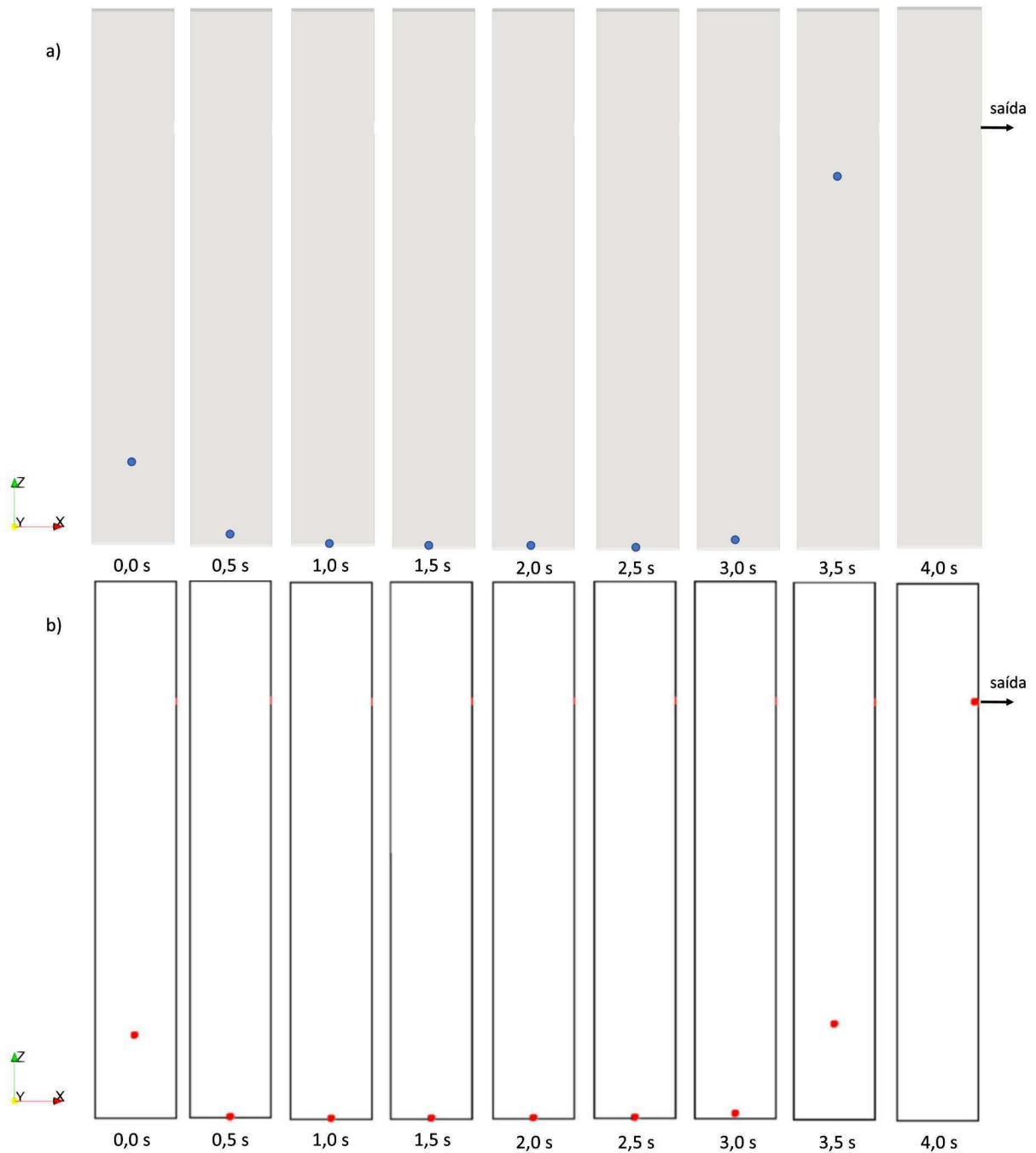


Figura 4.3 – Dinâmica da partícula durante a pirólise do a) presente trabalho e b) Papadakis et al. (2009c).

kis et al. (2009c) sai no tempo 3,93 segundos, uma diferença de 7,63 %. Essa discordância é devido aos diferentes modelos térmicos usados em cada trabalho, que faz com que a partícula tenha sua massa consumida com velocidades diferentes, afetando o balanço de forças e conseqüentemente, fazendo com que elas sejam carregadas para fora do reator também em tempos diferentes.

1.1.4. Densidade da Partícula

Papadikis et al. (2009c) considera em seu trabalho que a partícula é esférica e que não ocorre encolhimento no volume durante a pirólise. Já a presente pesquisa também considerou o formato da partícula esférica, porém trabalhou com o modelo de encolhimento de partícula apresentado na Equação 4.2.

$$V_i = \frac{m_i}{\rho_i} \quad (4.2)$$

onde m_i é a massa da partícula e ρ_i é a densidade dada pela média ponderada das densidades de cada componente que compõem a partícula. O resultado do comportamento da densidade da partícula analisado estatisticamente por um intervalo de confiança de 95% está apresentado na Figura 4.4.

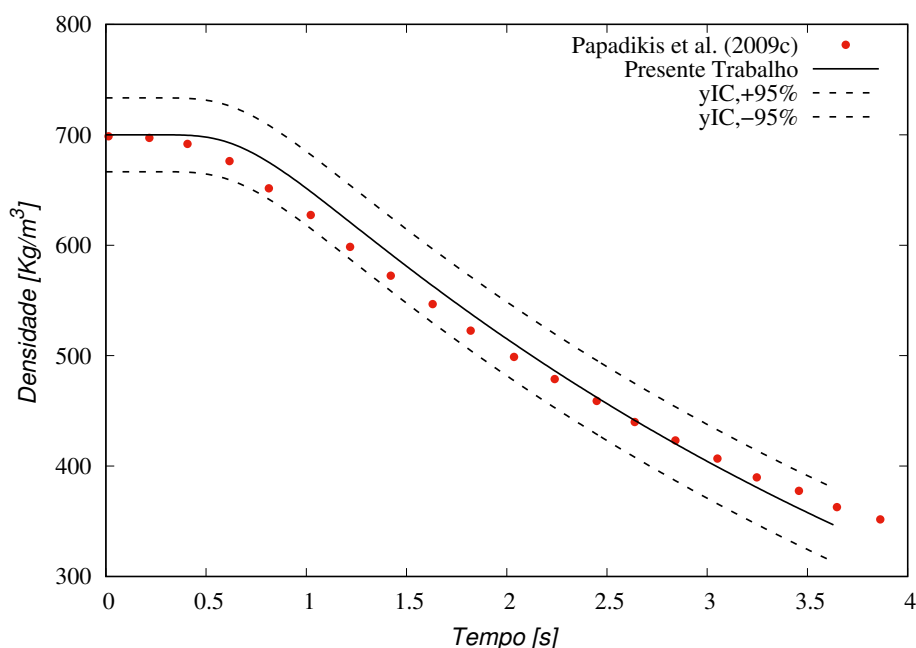


Figura 4.4 – Comportamento da densidade da partícula durante a pirólise.

Ao analisar a Figura 4.4, observamos que o comportamento da densidade obtido por este trabalho apresenta uma boa concordância ao resultado apresentado por Papadikis et al. (2009c), pois pode-se observar que os pontos coletados da literatura permaneceram dentro do intervalo de confiança calculado estatisticamente. Apesar da massa ter reagido mais rapidamente devido ao efeito do modelo térmico adotado, a variação do volume durante a pirólise considerado pela presente pesquisa, compensou o comportamento da massa e reduziu a taxa de diminuição da densidade durante a pirólise.

1.1.5. Rendimento Relativo da Reação de Pirólise

O rendimento relativo quantifica a proporção do biogás, do vapor de bio-óleo e do biocarvão formados e o quanto de biomassa restou ao fim do processo em comparação com a soma de todos os produtos. Para calcular o rendimento é usada a Equação 4.3.

$$\Psi_i = \frac{\int_0^4 m_{i,s} Y_i dt}{\int_0^4 m_{i,s} Y_{bio-óleo} dt + \int_0^4 m_{i,s} Y_{gás} dt + \int_0^4 m_{i,s} Y_{biocarvão} dt + \int_0^4 m_{i,s} Y_{biomassa} dt} \quad (4.3)$$

onde Ψ_i é o rendimento do produto i , $m_{i,s}$ é a massa do componente gasoso ou sólido na saída e Y_i é a fração mássica dos produtos da reação de pirólise.

Com o objetivo de validar os modelos que descrevem o comportamento da transferência de massa entre as fases, calculou-se o rendimento relativo ao longo do tempo dos produtos formados pela reação de pirólise e avaliou-se estatisticamente sua concordância com os dados reportados na literatura. Esses resultados podem ser observado na Figura 4.5.

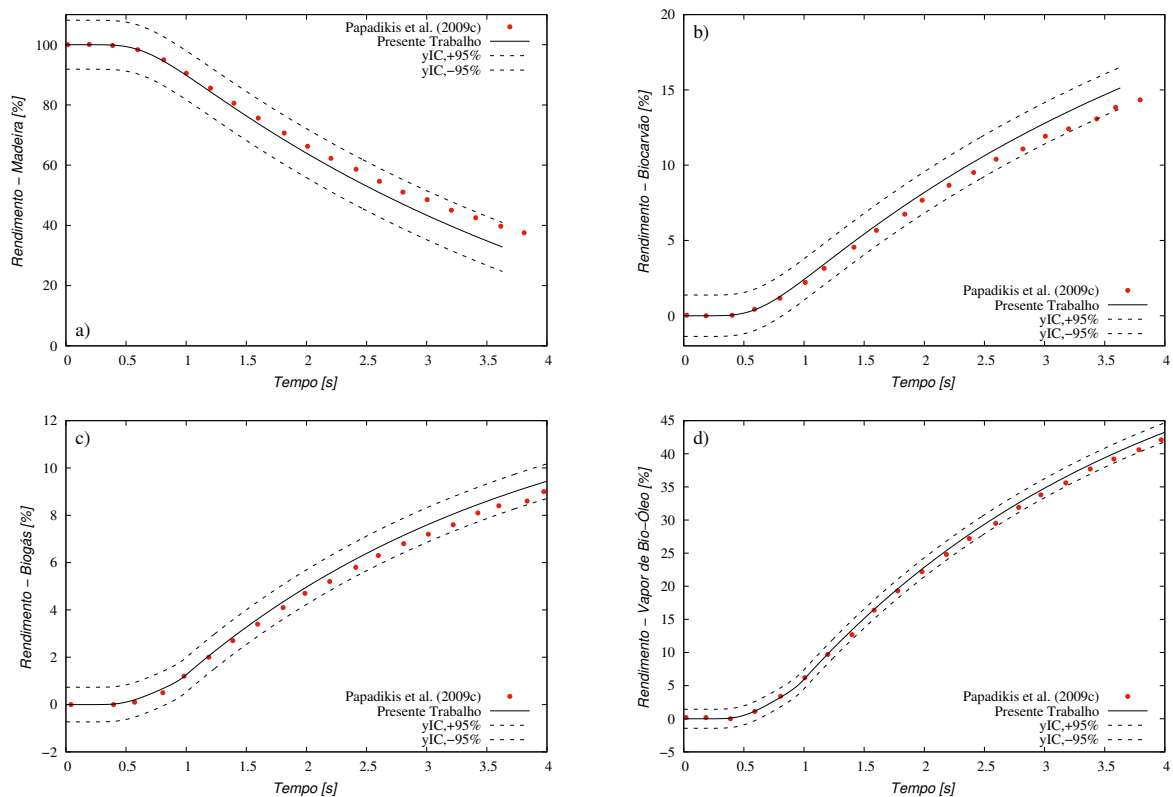


Figura 4.5 – Rendimento da a) biomassa, b) biocarvão, c) biogás e d) bio-óleo durante a pirólise.

Como toda reação irreversível, os reagentes vão sendo consumidos para a formação de produtos. Na reação de pirólise apresentada na Figura 4.5, é possível observar a biomassa sendo consumida, enquanto o biocarvão, biogás e o vapor de bio-óleo vão sendo gerados. Observa-se ainda na Figura 4.5 que tanto o comportamento do rendimento da biomassa, quanto o comportamento do rendimento dos produtos permaneceram dentro do intervalo de confiança estatístico de 95%, apontando uma semelhança aos comportamentos reportados por Papadikis et al. (2009c). As curvas tem seus valores mais próximos no início da simulação e apresentam um discrepância maior ao final dela. Para quantificar a diferença entre os resultados, comparou-se os valores dos rendimentos globais ao final da simulação, como pode ser observado na Tabela 4.2.

Tabela 4.2 – Valores do rendimento da reação de pirólise com a cinética semiglobal de dois estágios.

Cinética semiglobal de dois estágios.		
	Presente Trabalho	Papadikis et al. (2009c)
$Y_{Bio-óleo}$	43,05%	41,34%
$Y_{Biogás}$	9,18%	8,14%
$Y_{Biocarvão}$	14,87%	13,52%
$Y_{Biomassa}$	32,90%	37,00%

Ao observar a Tabela 4.2 nota-se que os rendimentos dos produtos obtido por esse trabalho são levemente maiores do que os reportados por Papadikis et al. (2009c), o que reflete no rendimento da biomassa, que é menor. A diferença dos resultados podem ser explicado pelo modelo térmico adotado pela presente pesquisa, que ao tratar a partícula com temperatura e condutividade uniforme ao longo do seu raio, tende a aumentar a velocidade da reação.

Quando comparado os valores dos rendimentos, observa-se um diferença de 1,71% para o bio-óleo, 1,04% para o biogás, 1,35% para o biocarvão e 4,10% para a biomassa. Esse último é maior devido a influência dos rendimentos dos produtos. A partir desse resultado, observa-se uma boa aproximação com os dados reportados por Papadikis et al. (2009c), podendo concluir que o modelo proposto consegue representar bem o comportamento da transferência de massa entre a fase particulada e a fase gasosa.

1.2. Simulações com a Cinética Multicomponente e Multiestágio

Trocou-se o mecanismo cinético semiglobal de dois estágio pelo mecanismo cinético multicomponente e multiestágios com o objetivo de deixar a modelagem da reação de pirólise mais próxima do fenômeno real, de modo que a partir das composições de celulose, hemicelulose e lignina, será possível o uso do modelo proposto para simular a pirólise de diversos tipos de biomassa. Para validar o comportamento reacional, comparou-se os resultados obtidos pela simulação da pirólise da celulose pura com os dados reportados por Xue et al. (2012) e Yang et al. (2021a), os resultados da pirólise do carvalho vermelho com os dados reportados por Xue et al. (2012) e Clissold et al. (2020), e os resultados da pirólise do bagaço da cana-de-açúcar com o trabalho de Suttibak (2017).

1.2.1. Celulose Pura

O modelo térmico utilizado no presente trabalho tem a recomendação de ser aplicado as partículas que apresentem o número de Biot menor que 0,1, portanto, o valor numérico de Biot foi calculado e representado na Tabela 4.3. Esse valor foi alcançado devido ao tamanho da partícula e ao valor da condutividade térmica da celulose pura.

Tabela 4.3 – Número de Biot para a simulação da celulose pura

Re_p []	Pr []	h [W/m^2K]	L_c [m]	k_b [W/mK]	Bi []
0,21	0,715	2529.98	$8,33 \times 10^{-6}$	0,3	0,07

Diante do exposto, simulou-se a pirólise da celulose pura conforme o experimento realizado por Xue et al. (2012). O resultado do rendimento da reação para a formação do vapor de bio-óleo, biogás, biocarvão e biomassa não reagida estão apresentados na Figura 4.6. Nela também constam o resultado do trabalho experimental de Xue et al. (2012) e as simulações realizadas por Xue et al. (2012) e Yang et al. (2021b).

Comparando os resultados obtidos com os dados reportados na literatura, observa-se que os rendimentos encontrados na simulação estão dentro de uma mesma faixa de grandeza, porém o rendimento do vapor do bio-óleo está um pouco acima do experimento, enquanto que o do biogás está um pouco abaixo. Para analisar melhor os desvios nos resultados de forma quantitativa, construiu-se a Tabela 4.4.

Ao analisar a Tabela 4.4, pode-se observar que os resultados encontrados pelo

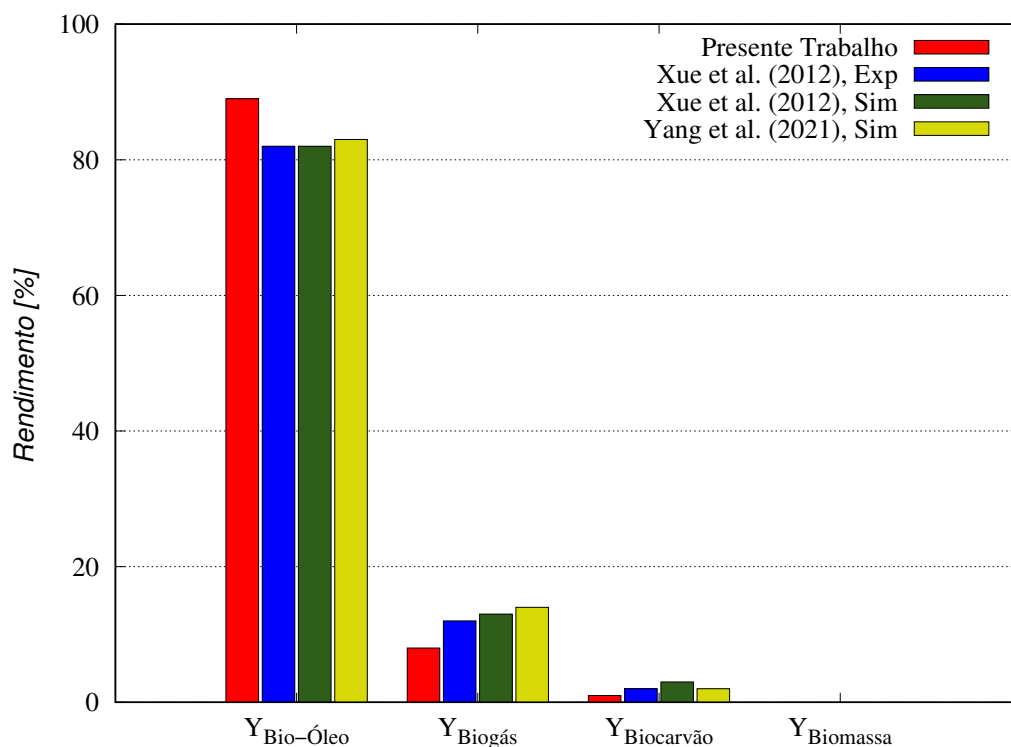


Figura 4.6 – Rendimento da pirólise da celulose pura.

Tabela 4.4 – Valores do rendimento da reação de pirólise para a celulose pura.

Celulose Pura				
	Simulado	Xue et al. (2012) _{Exp.}	Xue et al. (2012) _{Sim}	Yang et al. (2021b)
$Y_{Bio-óleo}$	89,27%	82,10%	82,20%	83,20%
$Y_{Biogás}$	8,79%	12,40%	13,90%	14,90%
$Y_{Biocarvão}$	1,94%	2,20%	3,30%	2,70%
$Y_{Biomassa}$	0,00%	0,00%	0,50%	0,00%

modelo proposto apresentam uma certa aproximação dos resultados reportados por Xue et al. (2012) e Yang et al. (2021b). A diferença observada no rendimento do vapor de bio-óleo está na casa de 7,17% acima do esperado, enquanto que o rendimento do biogás está 3,61 % abaixo do experimental. O rendimento do biocarvão é o mais próximo encontrado, apresentando um diferença de 0,26%.

A diferença obtida entre o simulado e o experimental podem ter como causa o efeito do leito de partícula inerte considerado no experimento que não foi adotado na simulação da celulose pura, considerando apenas uma única partícula de biomassa. A presença

deste leito ocasiona uma redução na velocidade do nitrogênio, que faz com que o vapor de bio-óleo permaneça mais tempo no reator o que favorece a formação do biogás, além de que uma menor velocidade do gás diminui a transferência de calor por convecção sobre as partículas de biomassa. Para testar esta hipótese, calculou-se o tempo de residência da fase gasosa no reator para o presente trabalho e para o trabalho de Xue et al. (2012) usando a Equação 4.4.

$$\varrho_g = \frac{H}{\bar{u}_g} \quad (4.4)$$

onde \bar{u}_g é a velocidade média da fase gasosa no leito e H é a altura do reator. Os resultados do tempo de residência da fase gasosa estão apresentados na Tabela 4.5.

Tabela 4.5 – Tempo de residência da simulação 2 e do trabalho de Xue et al. (2012).

Presente Trabalho			Xue et al. (2012)		
\bar{u}_g [m/s]	H [mm]	ϱ_g [s]	\bar{u}_g [m/s]	H [mm]	ϱ_g [s]
0,36	342,9	0,95	0,18	342,9	1,905

Observa-se na Tabela 4.5 que o tempo de residência da fase gasosa de Xue et al. (2012) é quase o dobro do tempo de residência da simulação da celulose pura, o que faz com que o vapor de bio-óleo permaneça no reator por quase 1 segundo a mais, favorecendo a reação secundária de produção de biogás a partir do vapor de bio-óleo. A diferença entre os dois casos reside no fato de que o experimento de Xue et al. (2012) envolve um leito de partículas. Nesse experimento, quando o gás entra no leito com uma velocidade de 0,36 m/s, ele sofre uma desaceleração devido à resistência fornecidas pelas partículas, resultando em uma velocidade média de 0,18 m/s após essa região. Em contraste, na simulação conduzida nesta tese, há apenas uma única partícula, a qual não oferece resistência ao escoamento do gás e que reduza a velocidade de 0,36 m/s para 0,18 m/s. Portanto, o uso da condição de contorno de um reator contendo um leito de partículas inertes para simular a pirólise de uma única partícula apresenta um erro associado ao tempo de residência da fase gasosa.

Para contornar esse problema, ajustou-se a velocidade de entrada da simulação da celulose pura para fazer com o tempo de residência se aproxime ao do trabalho de Xue et al. (2012). Por consequência, a condição de contorno da velocidade de entrada

foi alterada para 0,18 m/s. Como a alteração da velocidade de entrada do nitrogênio influencia na transferência de calor para a partícula, calculou-se o novo número de Biot para o presente cenário, a fim de identificar se houve alguma mudança significativa nesse parâmetro. O resultado é apresentado na Tabela 4.6.

Tabela 4.6 – Número de Biot para a simulação com $\rho_g = 1,905$

Re_p []	Pr []	h [W/m^2K]	L_c [m]	k_b [W/mK]	Bi []
0,11	0,715	2448,56	$8,33 \times 10^{-6}$	0,3	0,07

Observa-se na Tabela 4.6 que com a redução da velocidade não houve alteração no número de Biot, pois não houve uma mudança significativa no coeficiente de transferência de calor por convecção. Realizou-se a nova simulação com a velocidade calculada e os resultados do novo rendimento da reação para a formação do vapor de bio-óleo, biogás, biocarvão e biomassa não reagida estão apresentados na Figura 4.7.

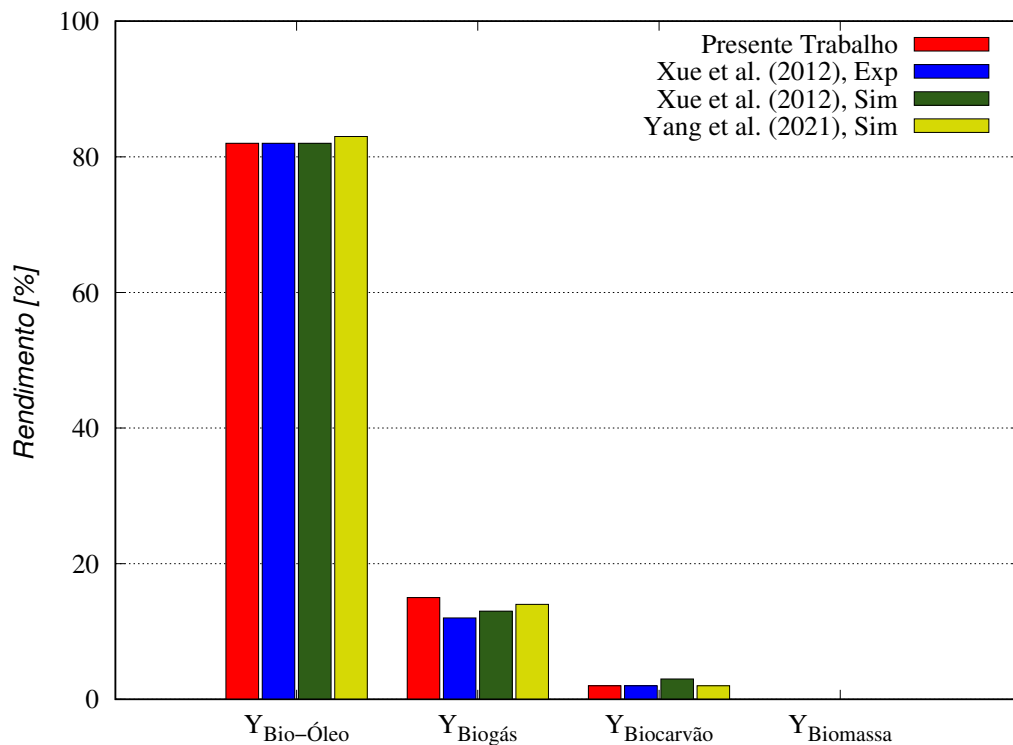


Figura 4.7 – Rendimento da pirólise da celulose pura ($\rho_g = 1,905$).

Ao comparar os resultados obtidos da nova simulação ($\rho_g = 1,905$ s) com os dados reportados na literatura, observa-se uma maior concordância em relação a simulação com o $\rho_g = 0,95$ s. Os rendimentos do vapor de bio-óleo e do biocarvão apresentaram

praticamente os mesmos comportamentos dos rendimentos experimentais. Os resultados apresentados na Tabela 4.7 permitem uma melhor análise dos valores encontrados.

Tabela 4.7 – Rendimento da reação de pirólise para a celulose pura para o $\varrho = 1,905$ s.

Celulose Pura				
	Simulado	Xue et al. (2012) _{Exp.}	Xue et al. (2012) _{Sim.}	Yang et al. (2021b)
$Y_{Bio-óleo}$	82,50%	82,10%	82,20%	83,20%
$Y_{Biogás}$	15,36%	12,40%	13,90%	14,90%
$Y_{Biocarvão}$	2,14%	2,20%	3,30%	2,70%
$Y_{Biomassa}$	0,00%	0,00%	0,50%	0,00%

Observa-se na Tabela 4.7 que ao diminuir a velocidade de entrada do nitrogênio, com o objetivo de ajustar o tempo de residência da fase gasosa da simulação com o cenário de pirólise na presença de um leito de partículas inertes, o rendimento do vapor de bio-óleo, do biocarvão e da biomassa não reagida praticamente foram iguais aos encontrados pelos experimentos realizados por Xue et al. (2012). O rendimento relativo do biogás apresentou uma diferença de quase 3% do dado experimental e 0,46% do reportado por Yang et al. (2021b). Ao realizar o somatório das frações mássicas dos dados experimentais encontra-se um valor de 96,7%, que pode ser atribuído aos erros experimentais ou imprecisão nas leituras, que se tiver ocorrido no medidor do biogás, os resultados dos rendimentos também ficariam bem próximos. Portanto, pode-se concluir que o erro observado na Tabela 4.4 é oriundo do tempo de residência da fase gasosa.

Os resultados apresentados nessa seção ratificam o comportamento de modelos de uma única partícula relatado por Papadikis et al. (2009b), nos quais afirmam que esse tipo de modelagem fornece uma visão muito boa de como o progresso da reação de pirólise é controlado e preveem as conversões e rendimentos precisos dos produtos, desde que as condições de contorno sejam adequadas para uma única partícula.

1.2.2. Carvalho Vermelho

Para analisar como o modelo da cinética multicomponente e multiestágio se comporta para outros tipos de biomassa com diferentes frações de celulose, hemicelulose e lignina, simulou-se a pirólise para a biomassa de carvalho vermelho. As frações mássicas de cada componente estão indicadas na Tabela 3.8.

De forma semelhante a celulose pura, a velocidade do nitrogênio foi ajustada para que o tempo de residência do gás seja igual ao tempo de residência de um reator contendo um leito de partículas inertes. Sendo assim, utilizou-se os resultados de Clissold et al. (2020) para obter a velocidade média dos gases no interior do reator e a Equação 4.4 para calcular o tempo de residência. O resultado está apresentado na Tabela 4.8.

Tabela 4.8 – Tempo de residência para a simulação do carvalho vermelho.

\bar{u}_g [m/s]	H [mm]	ϱ_g [s]
0,26	342,9	1,32

Fonte: Clissold et al. (2020)

A partir do tempo de residência da fase gasosa, foi modificado o valor da velocidade de entrada da simulação 3 para fazer com o tempo de residência se aproxime ao do trabalho de Clissold et al. (2020). Desse modo, a condição de contorno da velocidade de entrada usada foi de 0,26 m/s.

Como o diâmetro da partícula, as propriedades térmicas e as condições de contorno são diferentes da simulação da celulose pura, calculou-se o número de Biot e é apresentado na Tabela 4.9, visando verificar se a recomendação do modelo térmico é atendida.

Tabela 4.9 – Número de Biot para a simulação do carvalho vermelho.

Re_p []	Pr []	h [W/m ² K]	L_c [m]	k_b [W/mK]	Bi []
0,76	0,715	556,05	4,17x10 ⁻⁵	0,173	0,13

Pode ser observado na Tabela 4.9 que o número de Biot para a simulação do carvalho vermelho é maior que o 0,1 recomendado. Diferente do caso da celulose pura, o diâmetro da partícula é maior e a condutividade térmica é menor, o que faz com que a superfície da partícula seja aquecida mais rapidamente do que seu centro, refletindo no número de Biot. De forma análoga a simulação da cinética semiglobal de dois estágio, assumiu-se a consideração de modelar a partícula com temperatura e condutividade térmica uniforme.

Diante do apresentado, realizou-se a simulação da pirólise do carvalho vermelho. Os resultados do rendimento do vapor de bio-óleo, do biogás e do biocarvão estão apresentados na Figura 4.8.

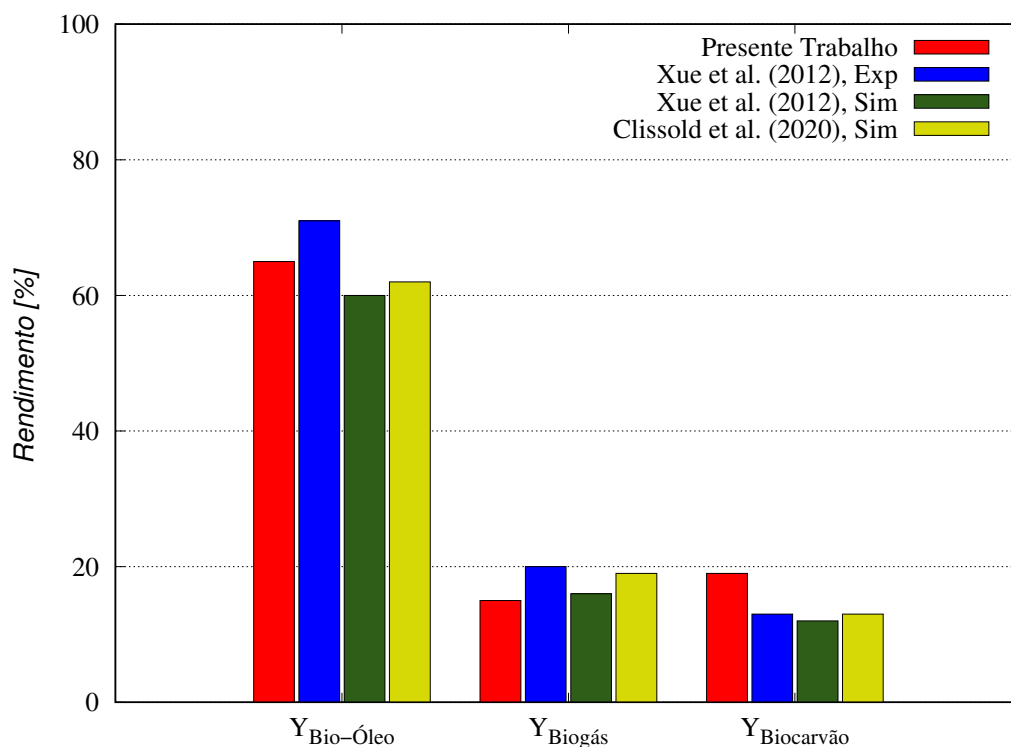


Figura 4.8 – Rendimento da pirólise do carvalho vermelho.

Comparando os resultados obtidos com os dados reportados na literatura, observamos que os rendimentos encontrados na simulação estão dentro de uma mesma faixa de grandeza, porém o rendimento do vapor do bio-óleo está um pouco abaixo do valor experimental e um pouco acima do simulado por Xue et al. (2012) e Clissold et al. (2020), enquanto que o rendimento do biogás está um pouco abaixo do valor experimental e semelhante ao reportado por Xue et al. (2012) e Clissold et al. (2020). Quando analisado o comportamento do rendimento do biocarvão, observa-se que ele se encontra acima dos resultados de Xue et al. (2012) e Clissold et al. (2020).

Ao analisar a Tabela 4.10 pode-se observar que o rendimento do vapor de bio-óleo apresenta uma certa semelhança quando comparado com os dados reportados na literatura, obtendo uma diferença de 4,75% em relação ao dado experimental. Quando observados os rendimentos do biogás e do biocarvão, nota-se que na simulação do carvalho vermelho o comportamento está invertido. Esperava-se que o rendimento do biogás estivesse mais próximo de 20%, enquanto que o rendimento de biocarvão estivesse mais próximo de 13%.

Diante da dificuldade de desenvolver uma cinética generalista que seja capaz de representar o comportamento da pirólise de qualquer fonte de biomassa, pois cada uma

Tabela 4.10 – Rendimento da pirólise para o carvalho vermelho.

	Carvalho Vermelho			
	Simulado	Xue et al. (2012) _{Exp.}	Xue et al. (2012) _{Sim}	Clissold et al. (2020) _{Sim}
$Y_{Bio-óleo}$	65,56%	$71,7 \pm 1,4\%$	60,5%	62,5%
$Y_{Biogás}$	15,02%	$20,5 \pm 1,3\%$	16,2%	19,2%
$Y_{Biocarvão}$	19,41%	$13,0 \pm 1,5\%$	12,3%	13,6%

delas apresentam suas particularidades e complexidade ao decorrer da reação, Miller and Bellan (1997) afirmaram que a cinética multicomponente e multiestágio pode, quando necessário, ser ajustada para representar melhor o comportamento da pirólise. Portanto, o presente trabalho ajustou a razão de formação de biocarvão ($\Lambda_c, \Lambda_h, \Lambda_l$), com o intuito de diminuir a sua produção e aumentar a produção do biogás. Os antigos valores e os novos valores estão apresentados na Tabela 4.11.

Tabela 4.11 – Valores da razão de formação de biocarvão.

Valores Antigos			Valores Novos		
Λ_c	Λ_h	Λ_l	Λ_c	Λ_h	Λ_l
0,35	0,60	0,75	0,18	0,43	0,58

Aplicando o método de tentativa e erro, chegou-se nos valores de razão de biocarvão apresentados na Tabela 4.11. Com esses valores, simulou-se novamente a pirólise do carvalho vermelho e os resultados do rendimento do vapor de bio-óleo, do biogás e do biocarvão estão apresentados na Figura 4.9.

Observa-se na Figura 4.9 que após os ajustes, o comportamento do rendimento de vapor de bio-óleo se manteve o mesmo, porém os rendimentos de biogás e biocarvão se aproximaram bastante do comportamento observado pelo experimento de Xue et al. (2012). Para uma análise mais quantitativa, construiu-se a Tabela 4.12 com os valores de rendimentos reportados na literatura.

Ao analisar a Tabela 4.12 observa-se que com o ajuste da razão de formação do biocarvão, o rendimento do biogás e do biocarvão estão dentro da margem de erro dos experimentos realizados por Xue et al. (2012). O rendimento do vapor de bio-óleo apre-

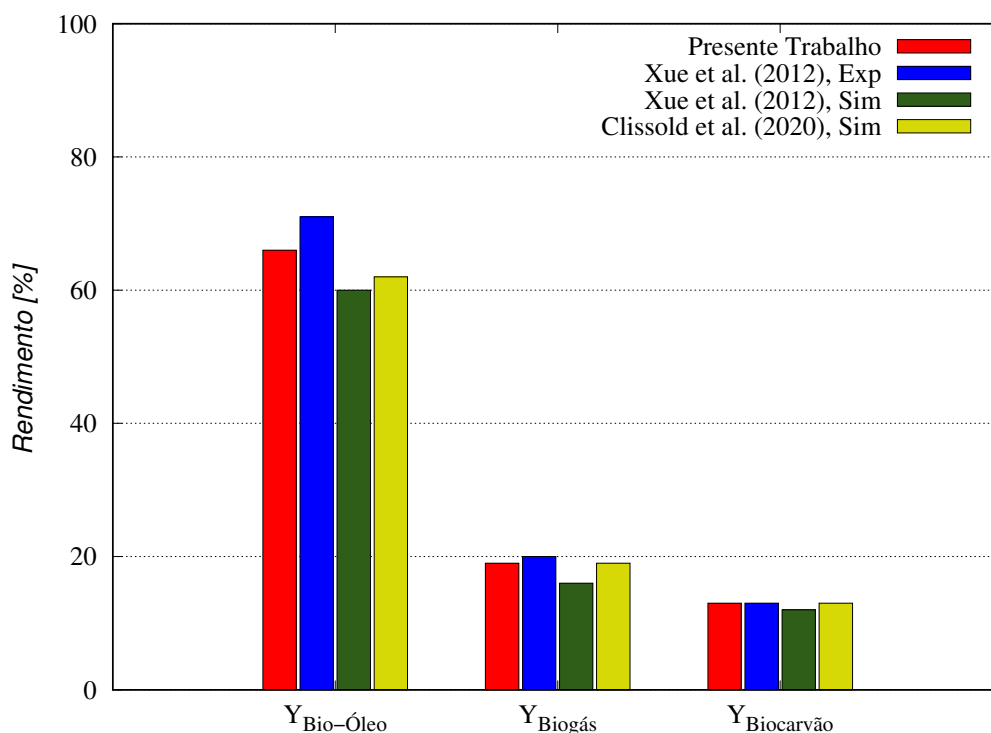


Figura 4.9 – Rendimento da pirólise do carvalho vermelho corrigido.

Tabela 4.12 – Rendimento da pirólise para o carvalho vermelho depois do ajuste.

Carvalho Vermelho				
	Simulado	Xue et al. (2012) _{Exp.}	Xue et al. (2012) _{Sim}	Clissold et al. (2020) _{Sim}
$Y_{Bio-óleo}$	66,56%	71,7 ± 1,4%	60,5%	62,5%
$Y_{Biogás}$	19,47%	20,5 ± 1,3%	16,2%	19,2%
$Y_{Biocarvão}$	13,97%	13,0 ± 1,5%	12,3%	13,6%

sentou uma diferença de quase 5,14 % do dado experimental e 4,06% do reportado por Clissold et al. (2020). Ao realizar o somatório das frações mássicas dos dados experimentais encontraram-se um valor de 105,2 %, que pode ser atribuído a erros experimentais ou imprecisão nas leituras, que se tiver ocorrido no medidor do vapor de bio-óleo, os resultados do rendimentos também ficariam bem próximos.

Os resultados apresentados nessa seção ratifica o resultado observado na seção da celulose pura, no qual valida que o comportamento de modelos de uma única partícula fornece uma visão representativa de como o progresso da reação de pirólise é controlado e que essa estratégia consegue prever as conversões e rendimentos de forma precisa dos produtos.

Acerca da cinética multicomponente e multiestágio, observou-se que para a pirólise da celulose pura o modelo conseguiu representar bem seu comportamento, porém para a biomassa de carvalho vermelho foi necessário ajustar as razões de produção de biocarvão. Em ambos os casos os fatores pré-exponenciais e as energias de ativação da cinética multicomponente e multiestágio descreveram bem o comportamento das reações, como pode ser visto pelos rendimentos obtidos do vapor de bio-óleo, do biogás e do biocarvão.

1.2.3. Bagaço da Cana-de-Açúcar

Como apresentado na seção da celulose e do bagaço vermelho, a modelagem da pirólise de uma única partícula consegue fornecer uma visão de como o progresso da reação de pirólise é controlado, além de conseguir prever os rendimentos dos produtos de forma precisa. Porém, foi observado que para alguns tipos de biomassa se faz necessário um ajuste nos parâmetros da reação da cinética multicomponente e multiestágio. Portanto, o objetivo dessa seção foi verificar a necessidade do ajuste dos parâmetros cinéticos.

De forma semelhante as demais análises, ajustou-se a velocidade do nitrogênio para que o tempo de residência da fase gasosa seja igual ao tempo de residência de um reator contendo um leito de partículas inerte. Para tanto, tomou-se como base o trabalho de Suttibak (2017). O resultado está apresentado na Tabela 4.13.

Tabela 4.13 – Tempo de residência para a simulação do bagaço da cana-de-açúcar.

\bar{u}_g [m/s]	H [mm]	ϱ_g [s]
0,21	342,9	1,63

A partir do tempo de residência da fase gasosa, ajustou-se a velocidade de entrada da simulação da cana-de-açúcar para fazer com que o tempo de residência se aproxime ao do trabalho de Suttibak (2017). Desse modo, a condição de contorno da velocidade de entrada usada foi de 0,21m/s.

Calculou-se o número de Biot para este cenário, uma vez que o diâmetro da partícula, as propriedades térmicas e as condições de contorno são diferentes das simulações da celulose pura e do carvalho vermelho, de modo a verificar se a recomendação do modelo térmico é atendida. O resultado está apresentado na Tabela 4.14.

Pode ser observado na Tabela 4.14 que, de forma semelhante ao problema do carvalho vermelho, o número de Biot para a simulação do bagaço da cana-de-açúcar é um

Tabela 4.14 – Número de Biot para a simulação do cana-de-açúcar.

Re_p []	Pr []	h [W/m^2K]	L_c [m]	k_b [W/mK]	Bi []
1,24	0,715	292,34	$8,33 \times 10^{-5}$	0,1	0,24

pouco maior que o recomendado. Diferente do caso da celulose pura e igual ao caso do carvalho vermelho, o diâmetro da partícula é maior e a condutividade térmica é menor, o que faz com que a superfície da partícula seja aquecida mais rapidamente do que seu centro, refletindo no número de Biot. De forma análoga a simulação da cinética semiglobal de dois estágios, assumiu-se a consideração de modelar a partícula com temperatura e condutividade térmica uniforme.

Diante do apresentado, realizou-se a simulação do bagaço da cana-de-açúcar e os resultados do rendimento do vapor de bio-óleo, do biogás e do biocarvão estão apresentados na Figura 4.10.

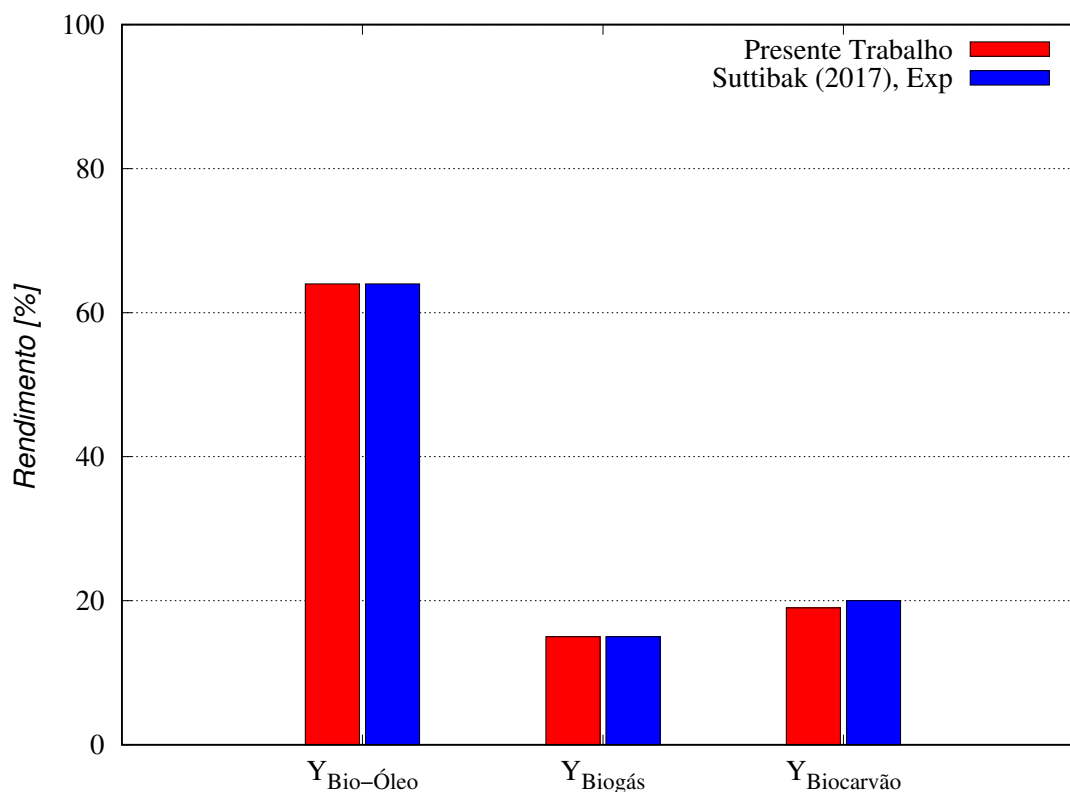


Figura 4.10 – Rendimento da pirólise da cana-de-açúcar.

Comparando os resultados obtidos da simulação da pirólise da cana-de-açúcar com os dados reportados na literatura, pode-se observar que os rendimentos encontrados na

simulação apresentam uma boa concordância. Para analisar melhor os desvios nos resultados de forma quantitativa, construiu-se a Tabela 4.15.

Tabela 4.15 – Rendimento da pirólise do bagaço da cana-de-açúcar.

	Cana-de-Açúcar	
	Simulado	Suttibak (2017) _{Exp.}
$Y_{Bio-óleo}$	64, 77%	64, 50%
$Y_{Biogás}$	15, 86%	15, 30%
$Y_{Biocarvão}$	19, 37%	20, 20%

Ao analisar a Tabela 4.15 observa-se que os rendimentos do vapor de bio-óleo, do biogás e do biocarvão estão próximos dos dados experimentais obtidos por Suttibak (2017). O rendimento do vapor de bio-óleo apresentou uma diferença de 0,27 % do dado experimental, o rendimento do biogás apresentou uma diferença de 0,56 % e o rendimento do biocarvão uma diferença de 0,83 %. Com diferenças pequenas entre os dados simulados e experimentais, não se viu a necessidade de ajustar os parâmetros cinéticos. Portanto, pode-se concluir que a cinética multicomponente e multiestágio conseguiu representar bem o comportamento da reação de pirólise do bagaço da cana-de-açúcar.

1.3. Simulação do Leito de Partículas Inerte

Com os modelos de transferência de calor e de massa validados por dados experimentais e conseguindo representar de modo satisfatório o comportamento das reações de pirólise, analisou-se agora o comportamento do leito de partículas inertes, comparando o resultado obtido com o apresentado no trabalho de Xu et al. (2016), como pode ser observado na Figura 4.11.

Ao analisar a Figura 4.11 pode-se observar que o comportamento do leito de partículas inertes do presente trabalho apresentou uma semelhança com o resultado experimental e com o resultado numérico obtido por Xu et al. (2016). Nota-se que a altura da fonte do leito de jorro alcançou aproximadamente 0,23 m, enquanto que o experimento de Xu et al. (2016) também marcou os mesmos 0,23 m. A altura do leito de partículas da simulação 5 alcançou 0,1 m frente a 0,12 m do dado experimental. Na região de jorro, o comportamento deste estudo apresentou uma pequena diferença em relação ao dado

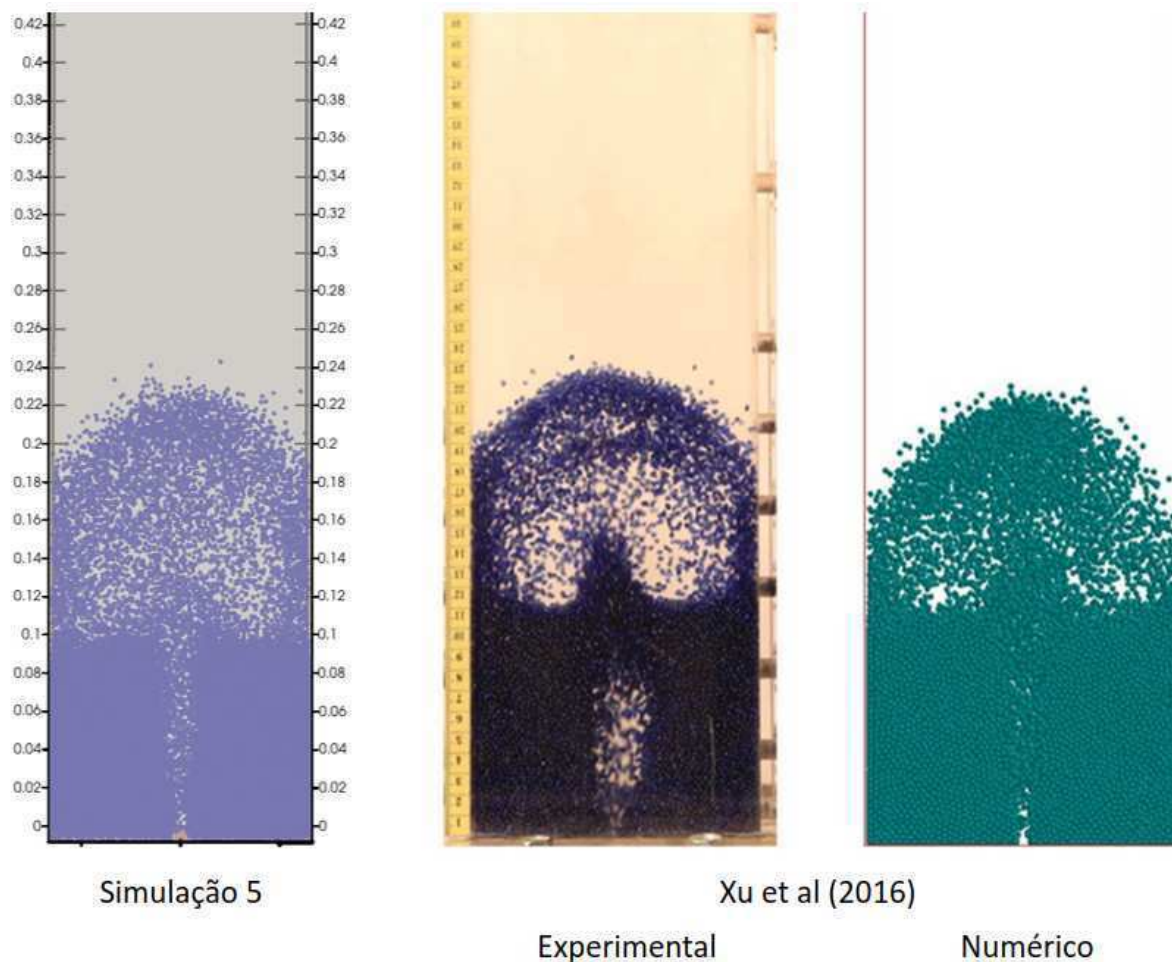


Figura 4.11 – Comportamento das partículas inertes no leito de jorro.

experimental, em que é possível observar a formação de um bolsão de ar no experimento de Xu et al. (2016). Esse fenômeno não obtido pela simulação desta pesquisa e nem pela simulação realizada pelo próprio Xu et al. (2016).

Ao comparar o formato da fonte, a simulação da presente pesquisa apresenta uma semelhança maior com o experimento do que a simulação realizada por Xu et al. (2016). O modelo proposto, conseguiu representar o espalhamento das partículas e suas colisões nas paredes do equipamento em uma altura próxima a do experimento, comportamento esse não visto na simulação realizada por Xu et al. (2016).

Pode-se, então, afirmar que o modelo DPM em conjunto com o modelo de colisão de partículas macias proposta pela presente pesquisa, conseguiu representar bem o comportamento do leito de partículas inerte. Podendo assim, analisar o comportamento da pirólise do bagaço da cana-de-açúcar em um leito de jorro na presença de partículas inerte.

2. PIRÓLISE DO BAGAÇO DA CANA-DE-AÇÚCAR

A partir dos resultados apresentados na seção anterior, pode-se concluir que o modelo proposto conseguiu representar bem o comportamento da dinâmica das partículas, da transferência de calor, massa e espécie química que governam o processo de pirólise em leitos de jorro. Observou-se uma boa concordância entre os resultados do rendimento relativo da reação de pirólise e da conversão da biomassa com os dados reportados na literatura. Diante disso, o modelo proposto foi utilizado para estudar o comportamento, os parâmetros geométricos e operacionais da pirólise do bagaço da cana-de-açúcar.

Para realizar o estudo do comportamento da pirólise do bagaço da cana-de-açúcar, tomou-se como referência o leito de jorro do trabalho de Xu et al. (2016). Nele, o ar entra no reator a temperatura ambiente com uma velocidade de 46,9 m/s. O leito de partículas inertes está a uma altura inicial de 100 mm e contém 29110 partículas de vidro, cujo diâmetro é de 2,6 mm e densidade de 2600 kg/m³. Para a análise da pirólise, substituiu-se o ar por gás nitrogênio à 500°C. Devido a diferença de densidade entre os fluidos, se mantida a velocidade, a vazão mássica que entraria no reator seria diferente, não ocasionando o jorro das partículas. Com base nestes resultados foi decidido manter o valor da vazão mássica na entrada do equipamento e calculou-se a nova velocidade de entrada do fluido, encontrando um valor de 128 m/s. Adotou-se, ainda, a consideração de que as paredes do reator são adiabáticas.

2.1. Comportamento do Leito

O leito de jorro é caracterizado por suas partículas apresentarem uma movimentação cíclica e mais uniforme quando comparado com o leito fluidizado, o que possibilita um contato mais efetivo entre a fase gasosa e a fase sólida. Com o objetivo de fazer com que as partículas de biomassa entrem no reator com esse comportamento já estabelecido, durante o primeiro segundo da simulação, consideraram-se presentes no equipamento apenas as partículas inertes. Esse tempo foi suficiente para o leito de jorro atingir o regime permanente, ficando evidente suas regiões características, além de conseguir identificar a movimentação cíclica das partículas. A Figura 4.12 apresenta o comportamento do reator descrito acima.

Observa-se na Figura 4.12 que as partículas inertes assumem o comportamento

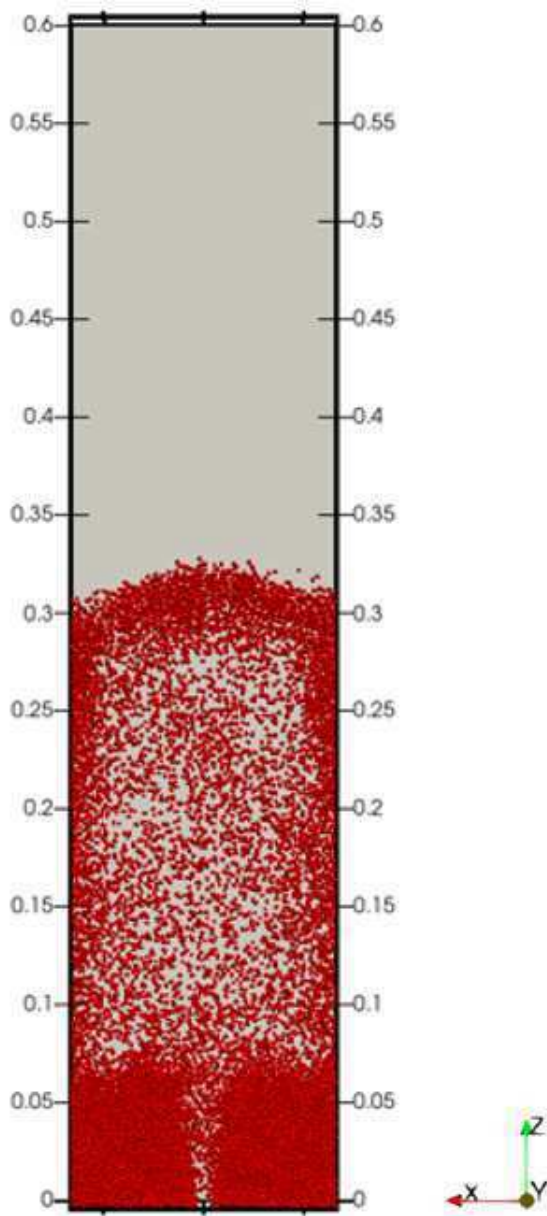


Figura 4.12 – Comportamento do leito de partículas inertes.

característico de um leito de jorro. Após a entrada do fluido pelo orifício localizado na região inferior do reator, nota-se uma aceleração ascendente das partículas e uma formação de um canal diluído no centro do equipamento, que é chamado de região de jorro. No entorno do canal central, identifica-se um leito denso de partículas que se deslocam contra o fluxo ascendente de nitrogênio, esta região é denominada como anulo ou região anular e entende-se como o leito deslizante de partículas. Quando as partículas que saem da região do jorro atingem a superfície do leito, elas entram em uma região chamada de fonte. Nessa localidade, as partículas tendem a desacelerar e cair sobre a região anular, onde deslizarão para a base da região do anulo e entrarão novamente na região do jorro,

fechando o ciclo que se mantém até o final da operação. Para as condições de contorno usadas na simulação, obteve-se uma altura de fonte de 0,33 metros.

Para entender melhor a movimentação das partículas inertes em cada região do equipamento, desde o momento em que ela entra na região de jorro até o momento em que ela sofre uma desaceleração na região da fonte e cai sobre a região anular, foi apresentado na Figura 4.13 o comportamento das partículas indicando a velocidade de cada uma na direção z.

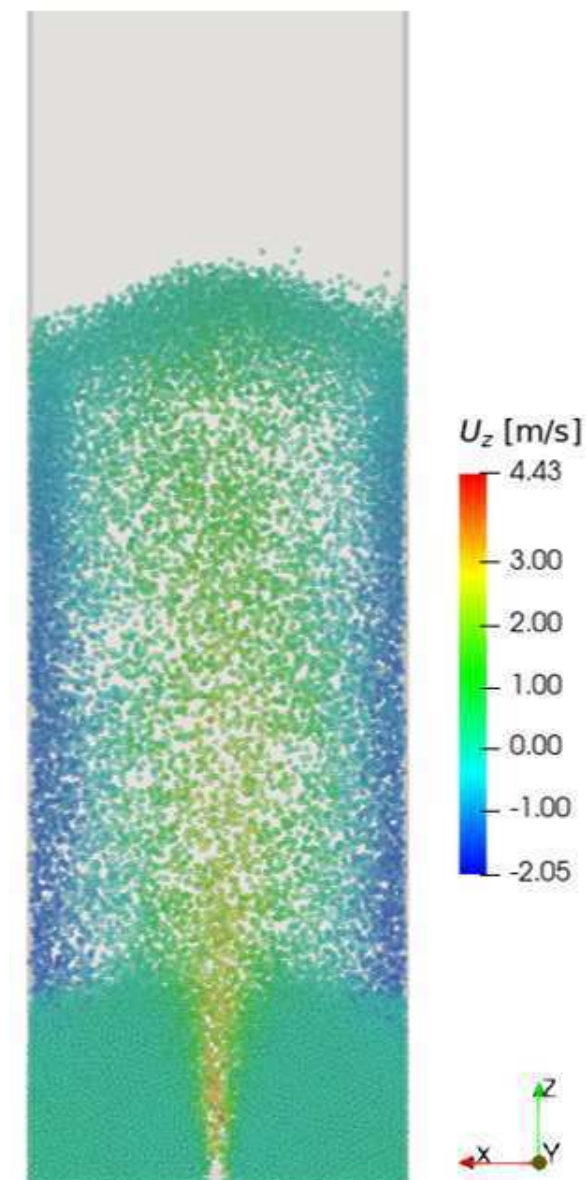


Figura 4.13 – Velocidade das partículas inertes.

Ao analisar a Figura 4.13, identifica-se que as partículas de maior velocidade estão localizadas na região do jorro, em que elas chegam a atingir uma velocidade de até 4,43

m/s. Esse comportamento é em decorrência da proximidade das partículas com o orifício de entrada do equipamento, onde o gás nitrogênio apresenta uma alta velocidade e consequentemente, consegue arrastar mais facilmente as partículas. À medida que o gás vai percorrendo a região da fonte, ele vai perdendo velocidade devido as resistências encontradas no escoamento, o que acarretará em uma diminuição na força de arraste sobre as partículas e portanto, a velocidade da partícula também diminuirá.

Ao entrar na região da fonte, as partículas sofrem uma desaceleração à medida que ascende no reator, obtendo uma velocidade nula no topo da fonte. Isso ocorre porque o gás inerte vai perdendo velocidade ao longo do escoamento e, por consequência, a força de arraste que atua sobre a partícula também vai diminuindo ao ponto de se igualar a força peso no topo da fonte. Nesse momento, as colisões entre as partículas as deslocam para a lateral do reator, onde a força de arraste é bem menor que no centro (devido ao orifício de entrada), o que faz com que essas partículas caiam sobre a superfície da região anular.

À medida que as partículas da região anular vão entrando na região do jorro e vão sendo arrastadas para a fonte, as partículas que caem sobre a superfície do ânulo vão descendo no leito em um movimento deslizante na direção oposta ao fluxo de gás até o momento que elas vão entrar na região do jorro e vão ser arrastadas para a fonte, ficando nesse comportamento cíclico até o final da operação.

2.2. Variação da Posição de Entrada da Biomassa

Uma vez que a pesquisa realizado por Xu et al. (2016) ocorre em um equipamento em batelada, não existe uma entrada específica para as partículas de biomassa. Para contornar esse problema, de forma a deixar o processo como contínuo, além de estudar o comportamento da pirólise com a biomassa entrando em diferentes regiões do reator, simularam-se três diferentes posições para a injeção do bagaço da cana-de-açúcar. A primeira geometria foi com a entrada localizada na próxima a base do reator (Simulação 6), a segunda foi com a entrada localizada na região da fonte (Simulação 7) e a terceira geometria foi com a entrada localizada no topo do equipamento (Simulação 8). Essas configurações foram apresentadas na Figura 3.6 da seção 2. do capítulo 3. Para suportar a escolha da geometria que será estudada na busca de otimizar os parâmetros operacionais, analisaram-se o comportamento e a temperatura das partículas, bem como a geração de

bio-óleo e de biogás ao longo reator.

Para os três cenários de configuração geométrica estudado, encontrou-se o número de Biot máximo igual a 0,74. Esse valor foi obtido devido ao diâmetro da partícula e a baixa condutividade do bagaço da cana-de-açúcar, o que aumenta a resistência interna na transferência de calor, refletindo no aumento do número de Biot. Como visto na seção de validação, é possível representar a conversão da biomassa, bem como os rendimentos dos produtos das reações de forma satisfatória para $B_i > 0.1$, portanto assumiu-se a consideração de modelar a partícula com temperatura e condutividade térmica uniforme.

2.2.1. Comportamento Dinâmico das Partículas

Compreender como as partículas de vidro e as partículas de biomassa se comportam no reator durante a pirólise ajudam no entendimento dos mecanismos de transferência de calor e massa, pois fornecem um conhecimento teórico para propor modificações tanto nos parâmetros operacionais quanto na geometria. Por isso, foi analisado a movimentação das partículas para as diferentes configurações de entrada, iniciando pelo cenário em que as partículas entram no reator pela região próxima a base do equipamento, conforme apresentado na Figura 4.14.

Observa-se na Figura 4.14 que ao entrar no equipamento pela região próxima a base do equipamento do lado direito, a biomassa se desloca em direção a região de jorro. Isso ocorre devido a própria movimentação das partículas inertes que são arrastadas pelo nitrogênio facilitando a movimentação da biomassa, além de serem auxiliadas pela velocidade de entrada das partículas de cana-de-açúcar na direção do jorro. Ao chegar no centro do equipamento, as partículas de biomassa também são arrastadas para a região da fonte, de modo que algumas delas conseguem sair dessa região e são carregadas para fora do reator, enquanto que as outras repetem o comportamento das partículas inertes e voltam para a região do ânulo. Durante todo esse percurso, a biomassa vai sendo aquecida e vai sofrendo reação. Aquelas que perderem massa a ponto da força peso ser pequena em relação a força de arraste são levadas para fora do reator, enquanto que as demais permanecem no comportamento cíclico do leito de jorro. Observa-se ainda que algumas partículas que estão saindo do reator apresentam material reativo, ou seja, ainda contêm materiais lignocelulóticos que fornecem capacidade de reação se tivessem permanecido no reator por mais tempo, o que afeta na eficiência do processo.

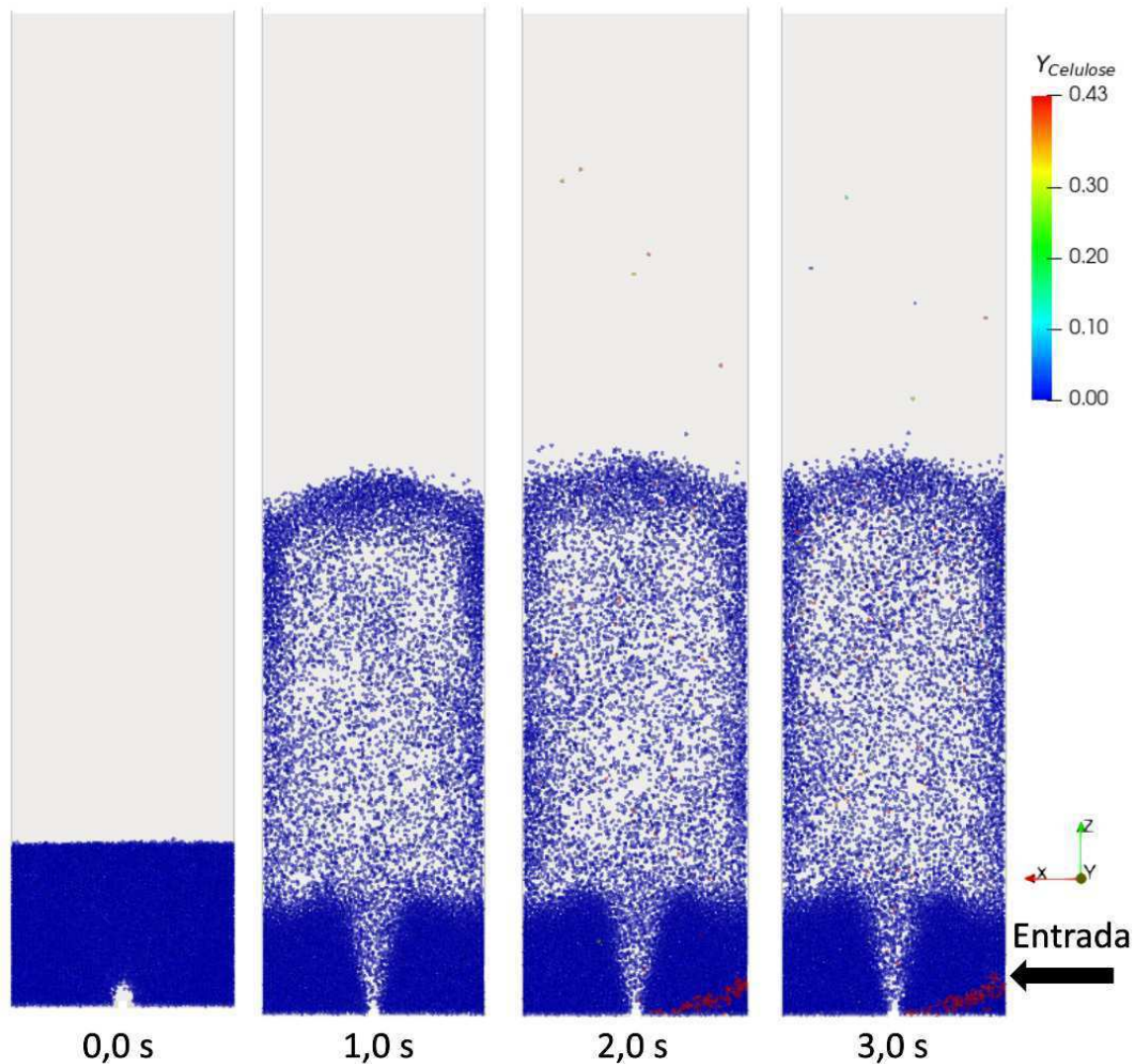


Figura 4.14 – Comportamento das partículas de biomassa durante a pirólise para a geometria com entrada próximo a base do equipamento.

A Figura 4.15 apresenta o comportamento das partículas inertes e das partículas de biomassa do cenário em que o bagaço da cana-de-açúcar entra no reator pela região localizada próximo ao meio do equipamento.

Ao analisar a Figura 4.15 verifica-se que quando as partículas de biomassa entram na região localizada próximo ao meio do equipamento pelo lado direito, elas podem apresentar dois comportamentos. No primeiro comportamento, as partículas conseguem chegar ao centro do equipamento onde são arrastadas para o topo da fonte. No segundo comportamento, devido as colisões sofridas pelas partículas assim que entram no equipamento, elas são impedidas de chegarem ao centro do reator e acabam se depositando na superfície da região anular. Em ambas as situações, as partículas vão sendo aquecidas

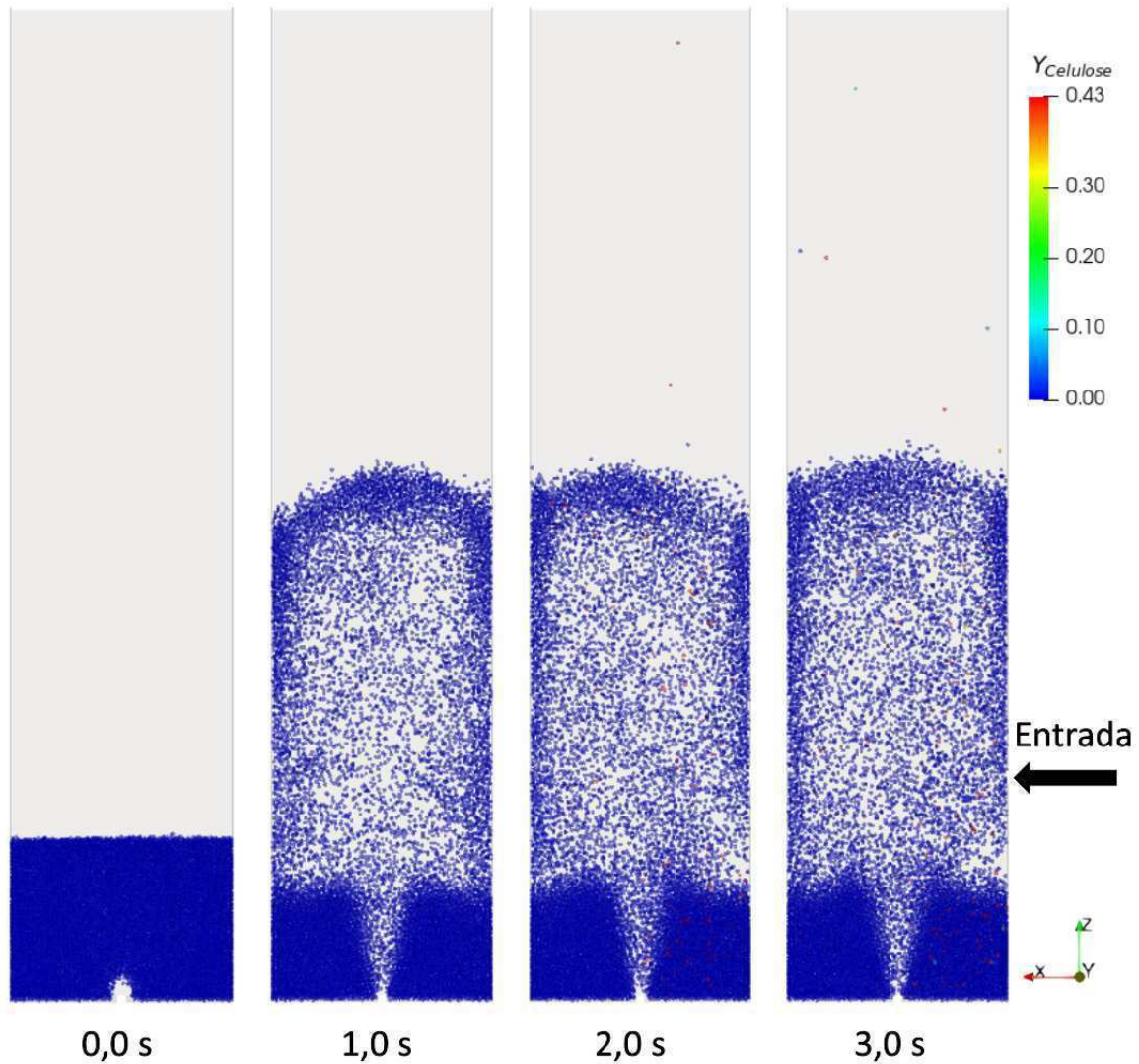


Figura 4.15 – Comportamento das partículas de biomassa durante a pirólise para a geometria com entrada próximo ao meio do equipamento.

e estão sujeitas ao comportamento cíclico do leito de jorro. Nesse cenário, observa-se também que algumas partículas de bagaço da cana-de-açúcar saem com material ainda passível de reação.

No primeiro comportamento descrito acima, as partículas de biomassa apresentam uma ação semelhante ao cenário em que o bagaço da cana de açúcar é injetado na região próxima a base do equipamento. Quando as partículas chegam no centro do equipamento, elas são arrastadas para o topo da fonte, de modo que as que perderam massa a ponto da força peso ser pequena em relação a força de arraste serão levadas para fora do reator, enquanto que as demais voltam para o leito de partículas e repetirão o ciclo característico do leito de jorro. Já no segundo comportamento, quando as partículas se depositam na

superfície do ânulo, elas vão descendo no leito em um movimento deslizante na direção oposta ao fluxo de gás até o momento em que elas chegam na região do jorro e são arrastadas para a fonte e, a partir desse momento, elas repetem o primeiro comportamento.

A Figura 4.16 apresenta o comportamento das partículas inertes e das partículas de biomassa do cenário em que o bagaço da cana-de-açúcar entra no reator pela região próximo ao topo do equipamento.

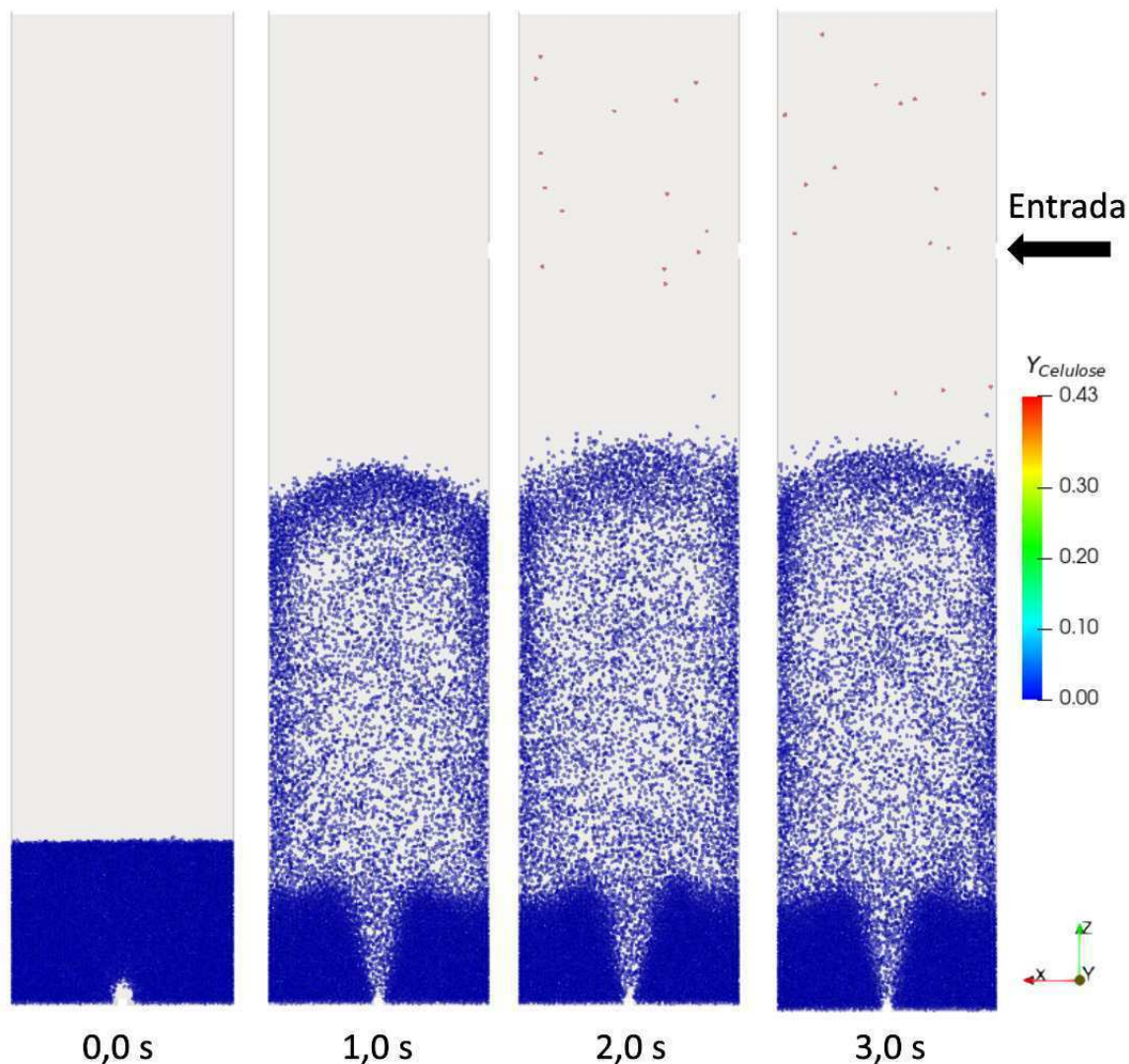


Figura 4.16 – Comportamento das partículas de biomassa durante a pirólise para a geometria com entrada próximo ao topo do equipamento.

No cenário que descreve o comportamento das partículas do bagaço da cana-de-açúcar quando elas entram próxima ao topo do equipamento, é possível observar na Figura 4.16 que as partículas de biomassa são arrastadas para fora do reator momentos depois que elas entram, não chegando a entrar na região da fonte e não participando do compor-

tamento cíclico característico das partículas de um leito de jorro. Ao entrarem em uma região bastante diluída, as partículas de biomassa não apresentam uma alta frequência de colisão, não oferecendo resistência a força de arraste exercida pela fase gasosa, desse modo, ocorre uma maior facilidade do gás em arrastar as partículas para fora do reator. Devido a esse comportamento físico é possível observar na Figura 4.16 que as partículas saíram com a mesma fração de celulose que entraram, indicando a não ocorrência das reações de pirólise.

2.2.2. Temperatura das Partículas

A temperatura é um parâmetro físico que nos ajuda a entender o comportamento das reações químicas que ocorrem durante a pirólise. Altas temperaturas tendem a facilitar as decomposições térmicas dos componentes orgânicos presente na biomassa, o que aceleram as reações. Enquanto que baixas temperaturas tendem a dificultar ou até mesmo não realizar a quebra das moléculas de hidrocarbonetos. Desse modo, analisar o comportamento da temperatura das partículas de biomassa no interior do reator é de fundamental importância para entender como ela afeta a produção de biogás e do vapor de bio-óleo, fornecendo mecanismos para a otimização. Na Figura 4.17 está exposto a temperatura de cada partícula ao longo do leito de jorro.

É possível observar na Figura 4.17 que no cenário em que a biomassa entra na região próximo a base do equipamento, as partículas do bagaço da cana-de-açúcar são aquecidas durante o deslocamento da região anular em direção a região do jorro, saindo de um temperatura de 30°C até uma temperatura de aproximadamente 300°C. Ao chegar na região do jorro, as partículas entram em contato com o gás nitrogênio a 500°C e na medida que vão sendo arrastadas ao longo do reator, as partículas vão tendo sua temperatura aumentada. Durante esse período, as partículas de biomassa vão reagindo com velocidade que dependem da temperatura alcançada. Ao chegar no topo do leito, as partículas que perderam massa suficiente para que a força de arraste vença a força peso, conseguem sair da fonte e são levadas para fora do reator, e as demais voltam para o leito de modo a repetir todo o ciclo. Nesse cenário, é fundamental que as partículas realizem alguns ciclos para atingirem a temperatura necessária para que as reações ocorram ao ponto de consumirem massa o suficiente para serem levadas para fora do reator. Mesmo assim, observa-se na Figura 4.17 que algumas partículas são arrastadas para fora do reator

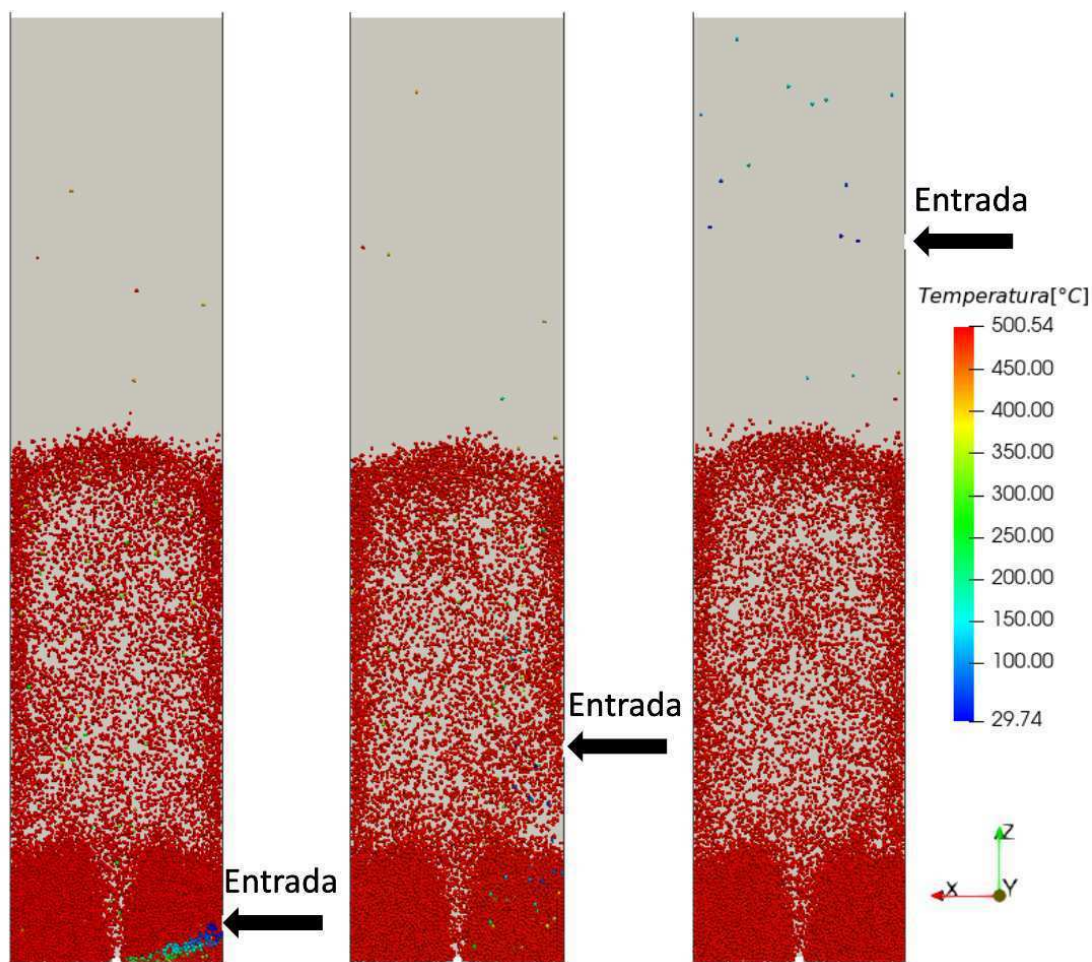


Figura 4.17 – Temperatura das partículas.

com temperaturas abaixo dos 500°C.

No cenário em que as partículas do bagaço da cana-de-açúcar entram na região localizada próximo ao meio do equipamento, tanto as partículas que são arrastadas para o topo da fonte, quanto as partículas que se depositam sobre a região anular, necessitam permanecer no reator por alguns ciclos para serem aquecidas a tal ponto das reações conseguirem consumir massa o suficiente para que elas vençam a força peso e saiam da fonte, sendo arrastadas para fora do reator. Também é possível observar na Figura 4.17 que existem partículas que deixam o leito de jorro com temperaturas abaixo dos 500°C de operação.

No cenário em que a entrada de biomassa está localizada próximo ao topo do equipamento, observa-se que quando as partículas entram no reator, elas entram em contato direto com o nitrogênio ascendente que já passou pela fonte. Pelo fato das partículas estarem em meio muito diluído, são mais facilmente carregadas para fora do equipamento,

ainda com temperaturas baixas. Esse comportamento ajuda a explicar a baixa fração mássica de celulose contida nas partículas de biomassa que deixam o reator observada na Figura 4.16.

2.2.3. Vapor de Bio-Óleo

O bio-óleo produzido durante a pirólise é uma mistura rica de inúmeros componentes químicos que apresentam capacidade de ser aplicado nos mais diversos seguimentos industriais, possuindo um alto valor agregado. Portanto, ele é um importante parâmetro a ser acompanhado no estudo. A Figura 4.18 apresenta o comportamento da fração mássica do vapor de bio-óleo ao longo do reator para os cenários de configurações geométricas.

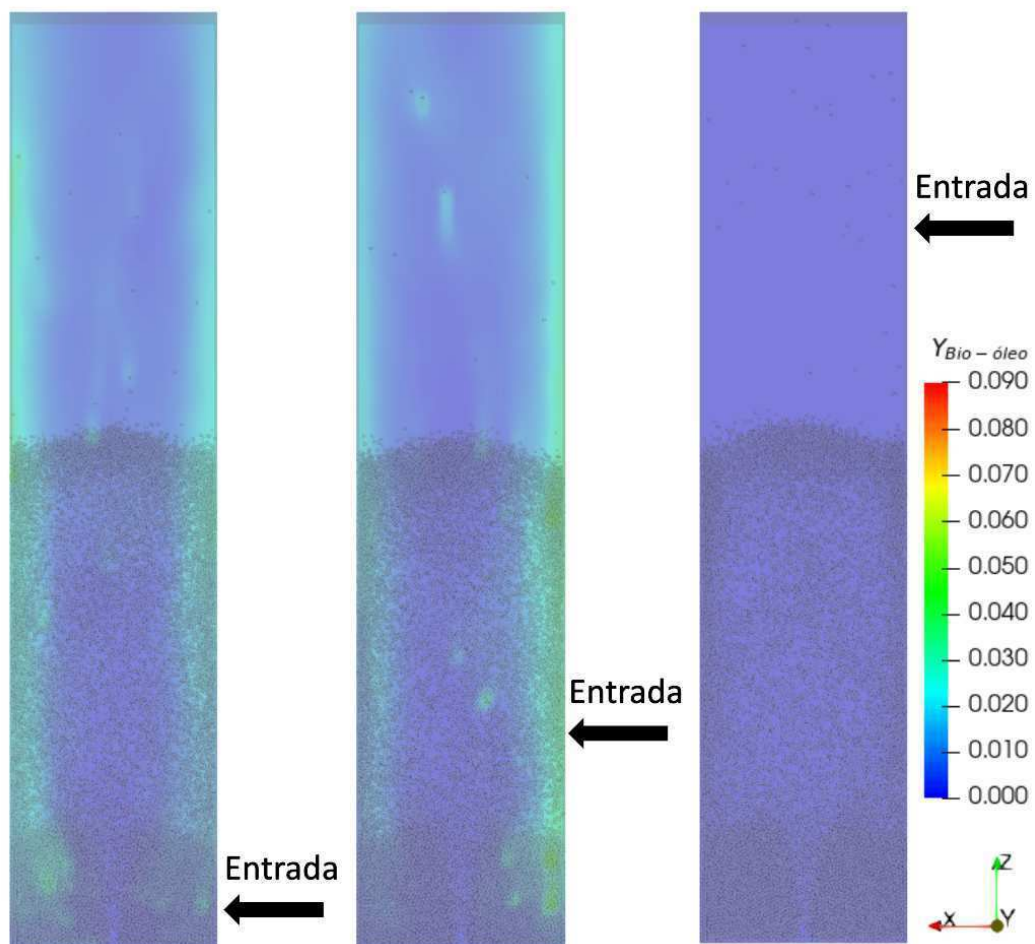


Figura 4.18 – Fração mássica do vapor de bio-óleo.

Ao analisar a Figura 4.18, nota-se que para o cenário em que a entrada da biomassa ocorre próximo ao topo do equipamento, a geração do vapor de bio-óleo é praticamente nula, enquanto que para os demais cenários é possível observar a sua formação. Conforme

discutido anteriormente, a não geração de bio-óleo é devido ao comportamento térmico e dinâmico das partículas de biomassa, onde foi visto na Figura 4.17, que elas deixam o reator com baixas temperaturas, a ponto das reações de pirólise não terem iniciados. Já nas simulações dos demais cenários, as partículas entram no equipamento em regiões de escoamento denso, dificultando sua saída e as fazendo participar do comportamento cíclico característico de um leito de jorro. Assim, essas partículas passam mais tempo no reator, chegando a temperaturas mais elevadas que possibilitam a ocorrência das reações de pirólise.

2.2.4. Biogás

O biogás gerado na reação de pirólise é composto por CO , CO_2 , H_2 e hidrocarbonetos de baixo peso molecular. Esse produto também apresenta várias aplicações, gerando ainda mais valor agregado ao processo. Na Figura 4.19 está apresentado o comportamento do biogás ao longo do leito de jorro para os cenários de configurações geométricas.

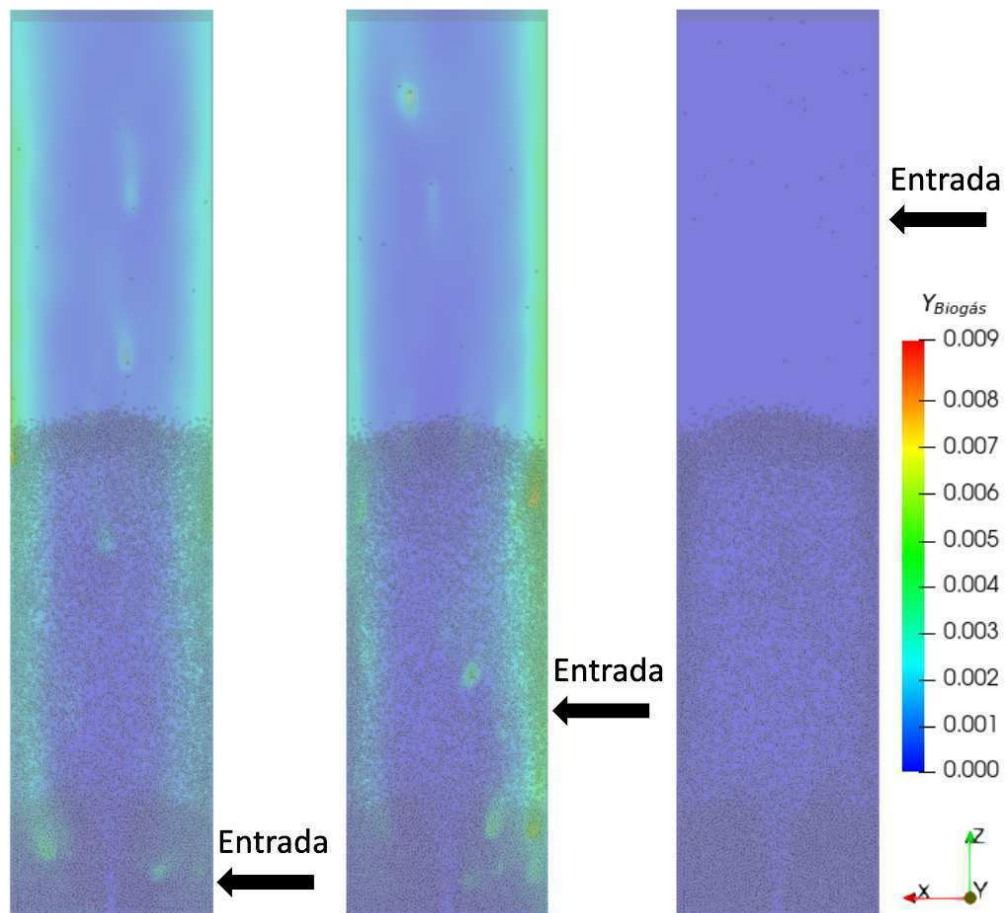


Figura 4.19 – Fração mássica do biogás.

Ao analisar o comportamento do biogás apresentado na Figura 4.19, é possível observar que o ele se assemelha ao comportamento observado na fração mássica do vapor de bio-óleo (Figura 4.18). No cenário em que as partículas de biomassa entram próximo ao topo do equipamento, não se identifica formação de biogás, o que confirma a ineficiência dessa configuração geométrica. Nos dois outros cenários estudados, pode-se observar o comportamento físico semelhante a geração do vapor de bio-óleo.

2.2.5. Conversão da Biomassa

Analisado o comportamento dinâmico e térmico das partículas do bagaço da cana-de-açúcar e como eles influenciaram na formação do vapor de bio-óleo e do biogás no reator de leito de jorro. Avalia-se neste momento como a posição da entrada interfere na conversão da biomassa. Para isso, estão apresentados na Tabela 4.16 os dados referente as quantidades de partículas e de massa do bagaço que entraram e saíram do reator ao longo dos 3 segundos de simulação, apresentou-se também a massa reagida e a conversão obtida em cada reator.

Tabela 4.16 – Comparativo da conversão da biomassa após três segundos de simulação.

Partículas de Biomassa			
	Topo	Meio	Base
Tempo [s]	3	3	3
Entrada de Partículas	520	520	520
Massa de Entrada [kg]	$5,70 \times 10^{-4}$	$5,70 \times 10^{-4}$	$5,70 \times 10^{-4}$
Saída de Partículas	448	110	72
Massa de Saída [kg]	$5,40 \times 10^{-4}$	$1,20 \times 10^{-4}$	$6,92 \times 10^{-5}$
Massa Reagida [kg]	$5,07 \times 10^{-9}$	$1,19 \times 10^{-4}$	$8,31 \times 10^{-5}$
Conversão da Biomassa [%]	0	20,88	14,58

Para as simulações dos três cenários, a massa do bagaço da cana-de-açúcar que entra no reator foi fixada em $5,70 \times 10^{-4}$ kg a fim de todas apresentarem a mesma quantidade de reagentes, de modo a possibilitar a comparação. Como o diâmetro da biomassa também foi fixado, a quantidade de partículas que entraram nos três reatores são as mesmas. Ao analisar a quantidade de partículas de biomassa que deixaram o reator, observa-se que

para a simulação em que a injeção da biomassa está próximo ao topo do equipamento, esse número foi de 448 enquanto que para as demais simulações esse número foi bem inferior. Esse resultado está de acordo com a discussão apresentada na seção referente a dinâmica das partículas (seção 2.2.1.), no qual mostra que quando as partículas entram próximo ao topo do equipamento, elas são arrastadas com mais facilidade do que quando entram na região próximo a base do equipamento ou na região localizada no meio do equipamento.

Ao examinar o comportamento da massa reagida apresentada na Tabela 4.16, podemos concluir que para o cenário que a biomassa entra próximo ao topo do equipamento, esse valor é muito pequeno quando comparado com os demais cenários. Esse resultado também foram constatados nas Figuras 4.18 e 4.19. Conforme discutido anteriormente, quando as partículas de biomassa entram no reator próximo ao topo do equipamento, elas encontram uma região com escoamento do tipo diluído, o que facilita o seu arraste para fora do equipamento ainda com baixas temperaturas, e conseqüentemente com as reações de pirólise em fase inicial, ocasionando uma conversão de 0%.

Referente as simulações em que as partículas de biomassa entram próximo ao meio e próximo a base do equipamento, pode-se observar ainda na Tabela 4.16 que a massa reagida do cenário em que as partículas entram na região localizada próximo ao meio do equipamento é maior que a massa reagida no cenário em que as partículas entram próximo a base do equipamento, o que resulta em uma maior conversão de biomassa nos 3 segundos de simulação. Porém, quando comparado a quantidade de partículas que deixaram o reator nesses dois cenários, constatam-se que existem 38 partículas de biomassa a mais presente no reator da simulação no qual a injeção da biomassa ocorre na região próximo a base do equipamento, o que pode indicar que se aumentar o tempo de simulação, podemos aumentar o valor da conversão. Para quantificar a possibilidade de produzir mais produtos de pirólise a partir do aumento do tempo de simulação, somaram-se a massa reagida com a massa no reator e chamou essa soma de potencial de reação. Seu valor esta apresentado na Tabela 4.17.

Ao dividir o potencial de reação pela massa de entrada, tem-se o potencial de conversão e pode-se observar na Tabela 4.17, que o potencial de conversão da simulação com a injeção de biomassa próximo a base do equipamento é maior do que o potencial de reação da simulação com a entrada da biomassa próximo ao meio do equipamento

Tabela 4.17 – Comparativo do potencial de reação da biomassa dos cenários 6 -8.

Partículas de Biomassa			
	Topo	Fonte	Ânulo
Massa de Entrada [kg]	$5,70 \times 10^{-4}$	$5,70 \times 10^{-4}$	$5,70 \times 10^{-4}$
Massa de Saída [kg]	$5,40 \times 10^{-4}$	$1,20 \times 10^{-4}$	$6,92 \times 10^{-5}$
Massa Transferida [kg]	$5,07 \times 10^{-9}$	$1,19 \times 10^{-4}$	$8,31 \times 10^{-5}$
Massa no Reator [kg]	$3,00 \times 10^{-5}$	$3,31 \times 10^{-4}$	$4,18 \times 10^{-4}$
Potencial de Reação [kg]	$3,00 \times 10^{-5}$	$4,50 \times 10^{-4}$	$5,01 \times 10^{-4}$
Potencial de Conversão [%]	5,26	78,95	87,86

em quase 10%, apontando que esse cenário tem a capacidade de fornecer uma maior conversão se aumentado o tempo de pirólise. Diante desse resultado, optou-se por aplicar o planejamento experimental numérico no reator que tem a injeção do bagaço da cana-de-açúcar na região próximo a base do equipamento.

2.3. Planejamento Experimental Numérico

Diante dos resultados obtidos na seção anterior, observou-se que o cenário em que a biomassa entra na região próximo a base do reator apresentou o maior potencial de conversão. Portanto, usou-se essa configuração geométrica para realizar o planejamento experimental numérico apresentado na Tabela 3.9 da seção 7. do capítulo 3 e os resultados serão discutidos a seguir.

Para os 8 cenários do planejamento experimental numérico apresentado na matriz de planejamento da Tabela 3.9, encontrou-se o número de Biot máximo variando de 0,84 para os cenários de maior velocidade a 0,70 para os cenários de menor velocidade. Esses valores foram obtidos devido ao diâmetro das partículas de biomassa, a velocidade de entrada do gás e a baixa condutividade do bagaço da cana-de-açúcar, o que aumenta a resistência interna na transferência de calor, refletindo no aumento do número de Biot. Como visto na seção de validação, é possível representar a conversão da biomassa, bem como os rendimentos dos produtos das reações de forma satisfatória para $B_i > 0.1$, portanto assumiu-se a consideração de modelar a partícula com temperatura e condutividade térmica uniforme.

2.3.1. Comportamento das Partículas Inertes

Com o objetivo de verificar se as simulações referentes a pirólise do bagaço da cana-de-açúcar em leito de jorro manteve o comportamento cíclico e característico do processo, apresentou-se na Figura 4.20 o comportamento dinâmico de cada partícula inerte no interior do reator no tempo de 1 s, momento esse que antecede a entradas das partículas de biomassa no equipamento.

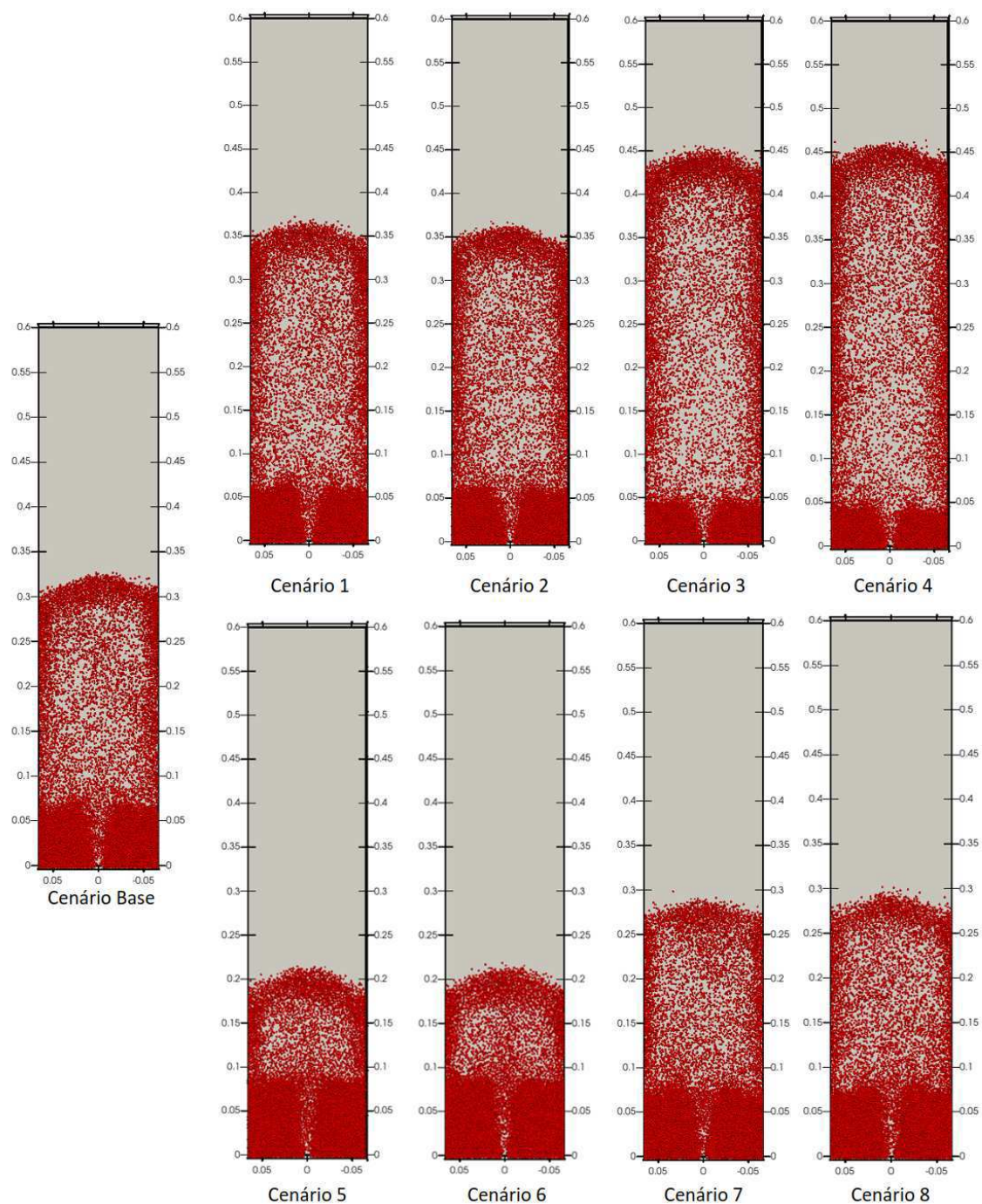


Figura 4.20 – Comportamento das partículas inertes para os cenários do DoE.

O cenário base apresentado na Figura 4.20 é referente a simulação do cenário que apresentou o maior potencial de conversão da seção anterior, no qual apresenta uma velocidade de 127,86 m/s, temperatura de 500°C e um diâmetro da partícula de biomassa de $2,6 \times 10^{-3}$. Ao analisar os demais cenários, pode-se constatar a formação das três regiões que são intrínsecas da operação em leito do jorro, o que indicam que as partículas apresentam o comportamento esperado e descrito na seção 2.1. do capítulo 4. Observa-se ainda que tanto as regiões do ânulo, do jorro e da fonte variam para cada cenário a depender das condições de contorno adotadas.

Nos quatro primeiros cenários, a velocidade de entrada do gás nitrogênio foi fixado em 142 m/s. No entanto, é visto que a altura atingida pelo leito de partículas inertes dos dois primeiros cenários foram diferentes dos dois últimos. Esse comportamento ocorreu devido ao efeito de compressibilidade do nitrogênio, no qual o valor da densidade sofre uma forte influência da temperatura. Nos cenários 1 e 2, a temperatura do gás foi fixada em 600°C, enquanto que no cenários 3 e 4 foram de 400°C. Desse modo, os dois primeiros cenários apresentam uma densidade menor do que os dois últimos, alterando a vazão mássica de nitrogênio que entra no reator e que influencia no arraste das partículas, e consequentemente na altura da fonte.

Nos cenários 5-8 é possível observar um comportamento semelhante aos quatro primeiros cenários. No qual, mesmo apresentado a mesma velocidade de 113 m/s, os cenários 5 e 6 apresentam a altura da fonte menor do que os cenários 7 e 8, devido a diferença da temperatura entre eles.

2.3.2. Resultados do DoE Numérico

A partir dos resultados das simulações dos 8 cenários traçados com o auxílio do planejamento experimental numérico, estão representados na Tabela 4.18 os valores da massa do bagaço da cana-de-açúcar que entra no reator, a massa reagida e a conversão encontrada após os 3 segundos de simulação para cada um dos cenários estudados.

Ao analisar a Tabela 4.18, observa-se que a maior conversão de biomassa ocorreu no cenário de maior velocidade, de maior temperatura e de menor partícula de biomassa. Nesse cenário, a alta temperatura fez com que as partículas se aquecessem mais rapidamente devido ao gradiente térmico gerado, de modo a favorecer o aumento da velocidade das reações. Referente ao efeito do diâmetro da partícula, quanto menor ele for, maior

Tabela 4.18 – Resultados do DoE numérico.

Cenários	U_g [m/s]	T_g [°C]	d_p [m]	$m_{entrada}$ [kg]	m_{transf} [kg]	X [%]	t [s]
1	142	600	$4,2 \times 10^{-3}$	$2,42 \times 10^{-3}$	$2,13 \times 10^{-4}$	08,80	3
2	142	600	$1,0 \times 10^{-3}$	$3,27 \times 10^{-5}$	$2,34 \times 10^{-5}$	71,56	3
3	142	400	$4,2 \times 10^{-3}$	$2,42 \times 10^{-3}$	$6,67 \times 10^{-9}$	00,00	3
4	142	400	$1,0 \times 10^{-3}$	$3,27 \times 10^{-5}$	$3,58 \times 10^{-6}$	10,94	3
5	112	600	$4,2 \times 10^{-3}$	$2,42 \times 10^{-3}$	$1,31 \times 10^{-4}$	05,42	3
6	112	600	$1,0 \times 10^{-3}$	$3,27 \times 10^{-5}$	$2,27 \times 10^{-5}$	69,61	3
7	112	400	$4,2 \times 10^{-3}$	$2,42 \times 10^{-3}$	$1,75 \times 10^{-9}$	00,00	3
8	112	400	$1,0 \times 10^{-3}$	$3,27 \times 10^{-5}$	$3,95 \times 10^{-6}$	12,11	3

será a facilidade de converter todo o material reativo em produtos, pois será mais rápido e fácil aquecer as partículas. Por fim, um acréscimo na velocidade aumenta a transferência de calor da fase fluida para a fase sólida através do mecanismo de convecção.

A diferença do cenário 1 em comparação com o cenário 2 é o tamanho do diâmetro da partícula. Esse parâmetro gerou uma diferença de 62,76% na conversão de biomassa, indicando que ele tem uma forte influência nas reações de pirólise, pois como comentado anteriormente, quanto menor a partícula, maior será a facilidade de converter todo o material reativo em produtos. Quando comparamos o cenário 2 com o cenário 4, nota-se que reduzir a temperatura de 600°C para 400°C gerou uma redução de 60,62 % na conversão de biomassa, apontando que a temperatura também apresenta uma forte influência nas reações de pirólise, resultado esse esperado uma vez que a temperatura acelera, retarda ou não inicia a decomposição das cadeias de hidrocarbonetos presentes na biomassa. Por fim, comparando o cenário 2 com o cenário 6, no qual a velocidade do nitrogênio difere os cenários, observou-se uma diferença na conversão do bagaço da cana-de-açúcar de apenas 1,95%, o que indica que a velocidade do gás apresenta uma baixa influência na conversão de biomassa.

Observa-se ainda na Tabela 4.18 que nos cenários em que se combinam baixa temperatura com alto diâmetro (cenários 3 e 7) não houve conversão de biomassa. Isso ocorre devido ao gradiente de temperatura entre a fase sólida e a fase gasosa não ser alto o suficiente para acelerar o aquecimento das partículas de biomassa, que quando atrelado ao maior diâmetro, dificulta ainda mais seu aquecimento e conseqüentemente, reduz a

velocidade das reações. Diante disso, os três segundos simulados não foram suficientes para se iniciar as reações presente no processo de pirólise.

Para analisar o quanto cada um dos efeitos influencia na conversão de biomassa, foi plotado na Figura 4.21 o gráfico de Pareto para cada um dos efeitos individuais e as suas interações de forma padronizadas.

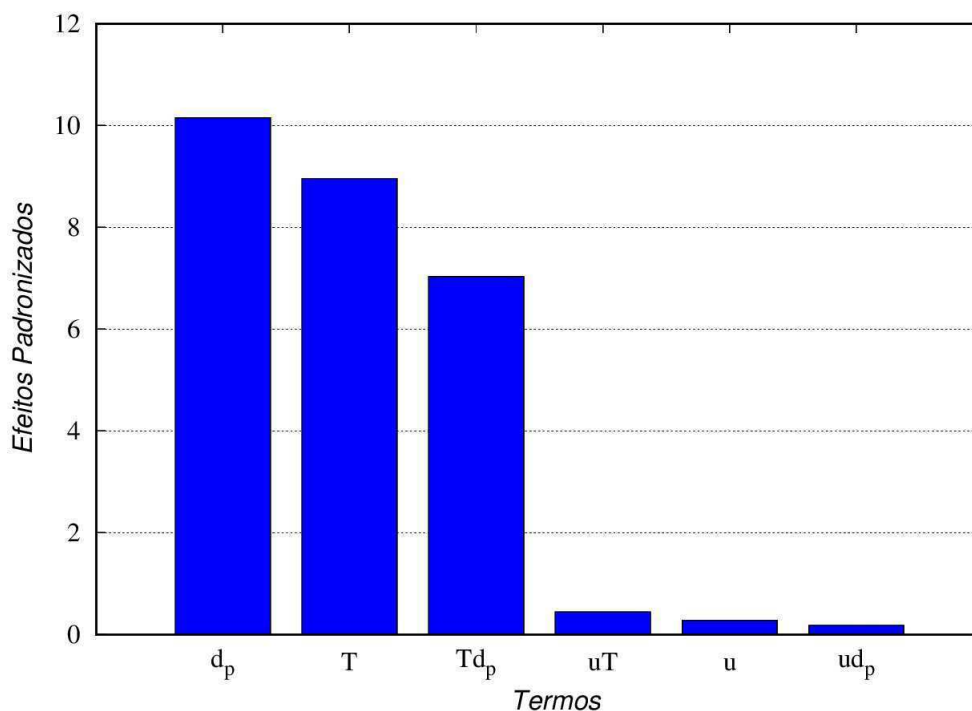


Figura 4.21 – Gráfico de Pareto para os efeitos analisados.

Ao analisar a Figura 4.21, pode-se concluir que o diâmetro das partículas e a temperatura do gás inerte são parâmetros operacionais que apresentam forte influência na conversão do bagaço da cana-de-açúcar, ratificando a análise realizada sobre Tabela 4.18. Observa-se ainda que a interação entre a temperatura do gás e o tamanho das partículas também exerce influência sobre a pirólise.

Com o objetivo de entender como cada um dos parâmetros analisados e a interação entre eles afetam a conversão da biomassa, foram plotados os gráficos dos efeitos principais (Figura 4.22) e os gráficos das interações dos efeitos (Figura 4.23).

Ao analisar a Figura 4.22, pode-se compreender como cada um dos parâmetros avaliados influenciam na conversão da biomassa. Ao observar o comportamento do diâmetro da partícula, concluímos que com o seu aumento a conversão da biomassa diminui drasticamente, apontando que esse parâmetro apresenta uma forte atuação no processo de pirólise, confirmando o que foi observado na Figura 4.21 e na Tabela 4.18. De modo que

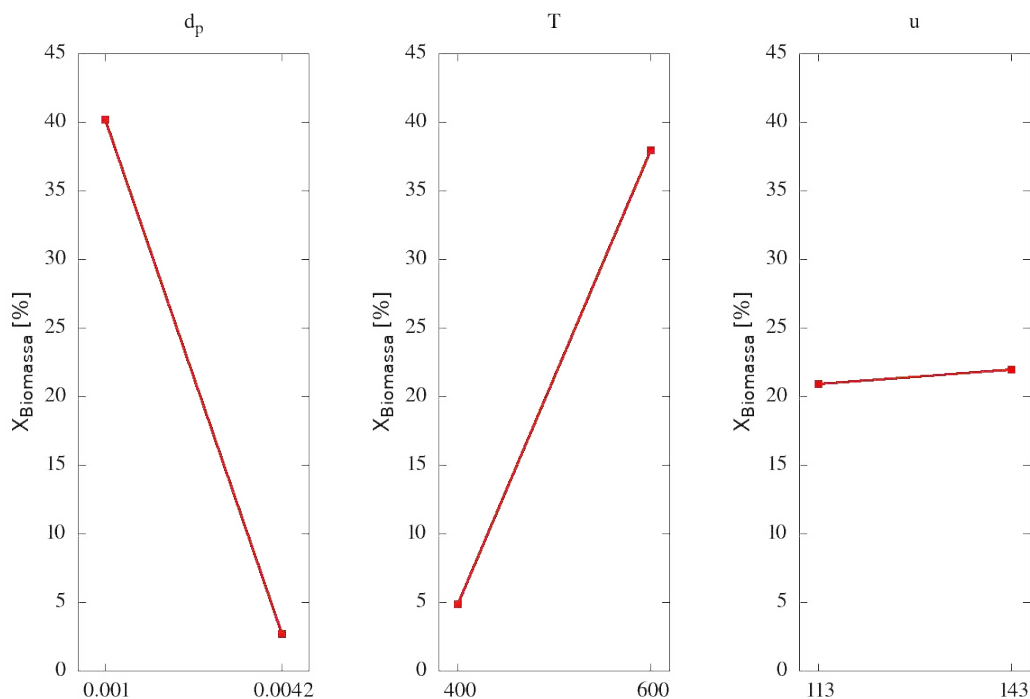


Figura 4.22 – Gráfico dos efeitos principais.

quanto maior for o diâmetro, menor é a transferência de calor para a partícula, o que retarda as reações, atingindo baixos valores de conversão.

Ao explorar os resultados referente ao comportamento da temperatura, constata-se que ela apresenta o comportamento inverso do observado no diâmetro da partícula. Quando se eleva a temperatura do gás inerte, observa-se um aumento significativo da conversão da biomassa. Esse comportamento pode ser explicado, pois com o aumento da temperatura, as cadeias de hidrocarbonetos tendem a se decompor mais facilmente em moléculas menores e mais simples, acarretando na elevação da velocidade de reação.

Referente ao comportamento da velocidade do gás, constata-se um pequeno aumento na conversão de biomassa quando eleva-se a velocidade de 113 m/s para 143 m/s. Esse comportamento está em acordo com o observado no gráfico de Pareto apresentado na Figura 4.21 e na discussão da Tabela 4.18, que mostra que a velocidade não exerce uma influência tão forte na variável de interesse. Isso ocorre devido a presença do leito de partículas inertes que tendem a reduzir a velocidade do nitrogênio ainda na entrada, de modo que no interior do leito de jorro retangular, ambas as velocidades estudadas estão com valores mais próximos do que o estipulado nas condições de contorno e consequentemente, os parâmetros convectivos de transferência de calor para as partículas também

estão próximos, acarretando em valores de conversão de biomassa semelhantes.

O gráfico das interações entre os efeitos (Figura 4.23) apresentam o comportamento de como os parâmetros em conjunto afetam nos resultados das reações através da conversão de biomassa.

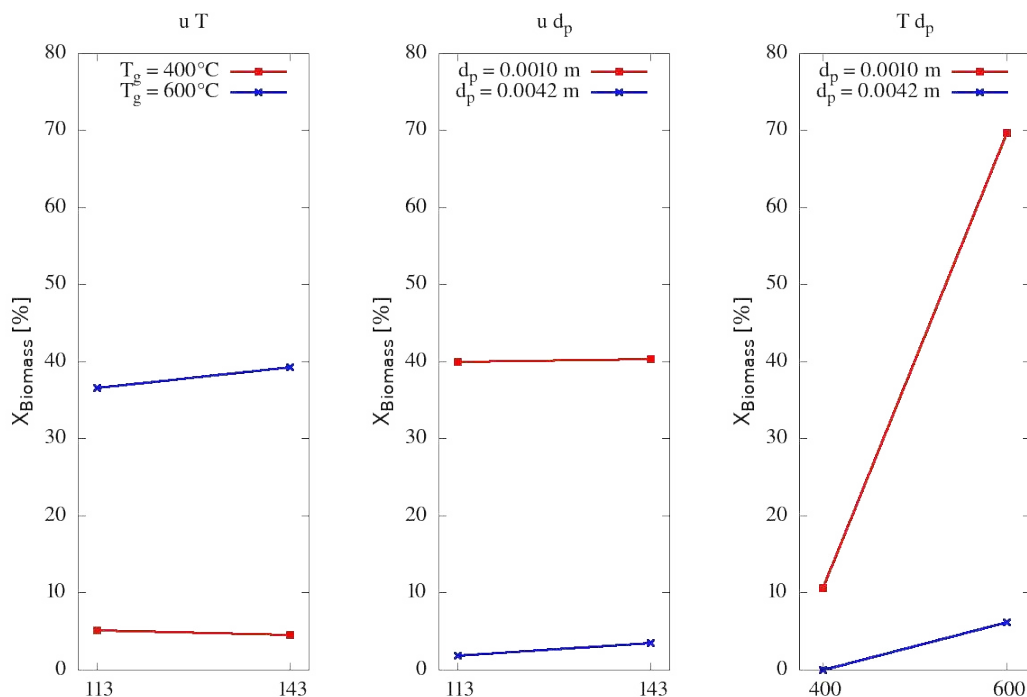


Figura 4.23 – Gráfico das interações dos efeitos.

Ao analisar a interação entre a velocidade e temperatura na Figura 4.23, pode-se concluir que conforme apontado no gráfico de Pareto, a atuação em conjunto apresenta uma baixa influência perante a conversão de biomassa. Ao manter a temperatura em 600°C e variar a velocidade de 113 m/s para 143 m/s, observa-se um pequeno aumento na conversão da biomassa, enquanto que para a temperatura de 400°C percebe-se uma leve queda. Conforme explicado anteriormente, a presença do leito de partículas inertes tende a diminuir as velocidades do nitrogênio na entrada e manterem as velocidades no interior do equipamento próximos, o que causa uma transferência de calor semelhante para as partículas, provocando uma pequena variação na conversão da biomassa. A distância entre as retas é devido a influência da temperatura.

Ao examinar o resultado referente a interação entre a velocidade e o diâmetro da partícula, pode-se afirmar que a relação entre esses dois parâmetros não ocasionam um impacto significativo na conversão da biomassa. Para ambos os diâmetros estudados, o

aumento da velocidade proporciona um leve aumento na variável de interesse. A distância observada entre as duas retas é gerada pela influência da temperatura.

Diferentemente das demais interações, o comportamento da temperatura em conjunto com o diâmetro das partículas apresentam um efeito significativo no processo de pirólise, principalmente quando as partículas são pequenas. Para o diâmetro de 0,001 m, ao elevar a temperatura de 400°C para 600°C, observa-se um aumento de quase 60% na conversão, enquanto que para o diâmetro de 0,0042 m, houve um aumento de quase 8%. Esse resultado mais uma vez está de acordo com os resultados apresentados na Figura 4.21 e na Tabela 4.18. Esse comportamento ocorre devido a facilidade de aquecer partículas menores, o que acelera a reação e aumenta o consumo do bagaço da cana-de-açúcar.

A partir dos resultados discutidos anteriormente, pode-se concluir que a temperatura e o diâmetro das partículas de biomassa foram os parâmetros operacionais que apresentaram as maiores influências sobre o processo de pirólise, proporcionando uma maior conversão de biomassa. Portanto, estão representados na Figura 4.24 o comportamento da conversão de biomassa, a partir da variação da temperatura e do diâmetro da partícula, para uma velocidade fixa em 128 m/s.

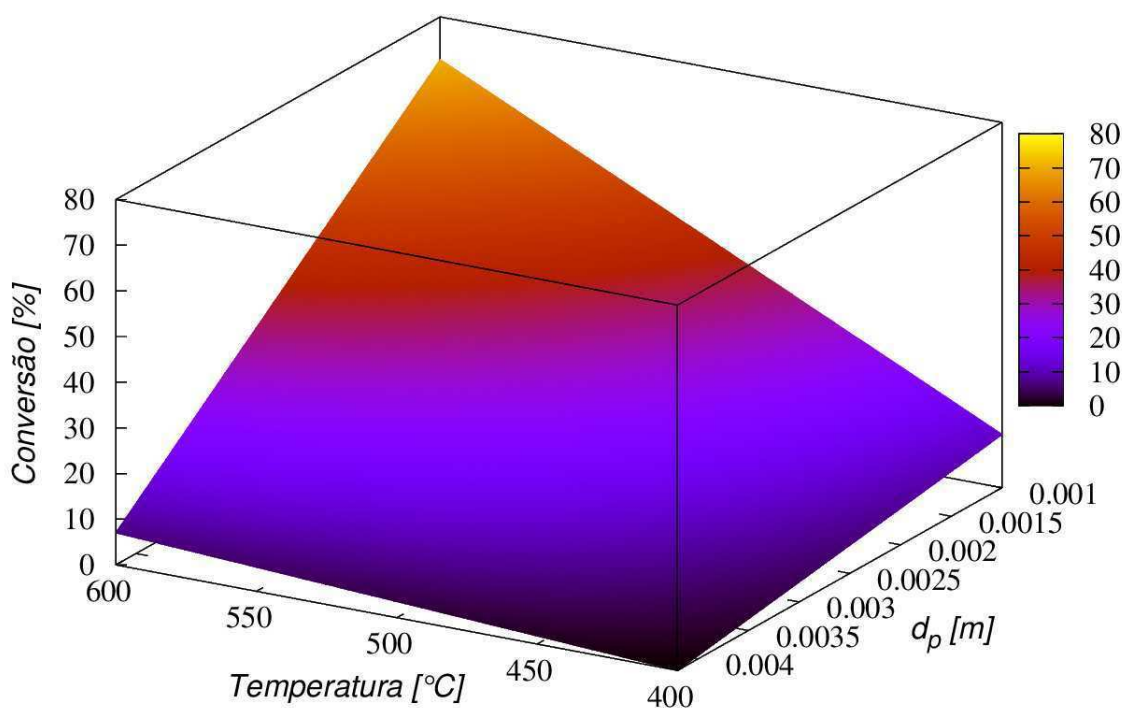


Figura 4.24 – Conversão do bagaço da cana-de-açúcar na pirólise em leito de jorro em função da temperatura e diâmetro da partícula.

Verifica-se na Figura 4.24 que os maiores valores de conversão de biomassa estão localizados nos cenários de maior temperatura e menor diâmetro. Enquanto que os cenários de menor conversão estão localizados em baixas temperaturas e altos diâmetros. Observa-se ainda que, se mantido um alto diâmetro e aumentar a temperatura ou se mantida uma baixa temperatura e diminuir o diâmetro, a conversão de biomassa continua pequena. Portanto, podemos concluir que para se obter altas conversões do bagaço da cana-de-açúcar é necessário o aumento da temperatura e a diminuição do diâmetro das partículas de forma conjunta.

3. CENÁRIO OTIMIZADO

A partir dos resultados do planejamento experimental simulado, pode-se concluir que a simulação 10, representado pelo segundo cenário do DoE, no qual as condições de contorno foram configuradas para possuírem uma velocidade de entrada do gás de 142 m/s, uma temperatura de 600°C e o diâmetro das partículas de biomassa de $1,0 \times 10^{-3}$, foi a que apresentou a maior conversão de biomassa. Diante disso, simulou-se esse cenário por 10 segundos. Seus resultados serão apresentados nessa seção.

3.1. Conversão e Rendimento

Foi discutido na seção 2.2.5. que na geometria em que a injeção de biomassa ocorria pela região anular, existia uma quantidade de bagaço de cana-de-açúcar presente no reator que poderia reagir se aumentado o tempo de simulação, por isso, para essa simulação de 10 segundos foi calculado o novo valor de conversão de biomassa, afim de confirmar essa suspeita. O resultado está apresentado na Tabela 4.19.

Tabela 4.19 – Conversão da biomassa para a simulação de 10 segundos.

$m_{entrada}$ [kg]	m_{transf} [kg]	X [%]	t [s]
$1,47 \times 10^{-4}$	$1,24 \times 10^{-4}$	84,35	10

Ao analisar a Tabela 4.19, pode-se confirmar a suspeita discutida na seção 2.2.5.. O aumento do tempo de simulação proporcionou um aumento na conversão de biomassa, indicando que os 3 segundos simulados no planejamento experimental numéricos não fo-

ram suficientes para a reação de pirólise atingir o estado estacionário. Esse resultado não invalida a análise realizada pelo DoE numérico, pois a comparação entre os cenários foram realizados na mesma base de tempo, fornecendo uma boa resposta quanto a eficiência dos parâmetros operacionais. O tempo de 3 segundos foi usado devido ao esforço computacional requerido para cada simulação, levando em consideração o prazo de entrega da tese. Para identificar o tempo em que a simulação entrou em regime estacionário, foi construído o gráfico apresentado na Figura 4.25.

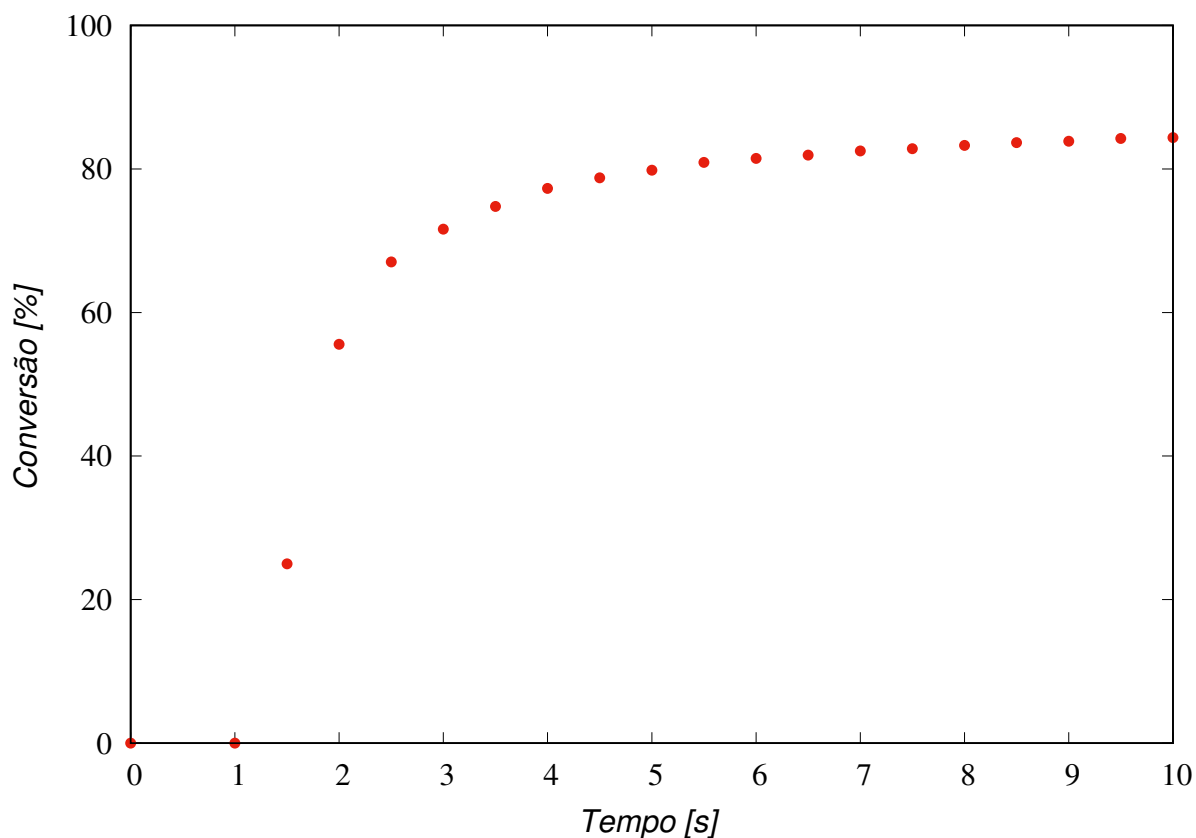


Figura 4.25 – Taxa de conversão da biomassa ao longo da simulação.

Ao observar a Figura 4.25, pode-se notar que no tempo de 3 segundos as reações da pirólise ainda não haviam atingido o regime estacionário, algo mais próximo de acontecer no tempo de 10 segundos, uma vez que a conversão ainda cresce lentamente, porém, com uma diferença de 1,3 % em relação a conversão no tempo de 8 segundos.

3.2. Produtos da Pirólise do Bagaço da Cana-de-Açúcar

Os produtos gerado na pirólise podem ser classificados em vapor de bio-óleo, biogás e biocarvão. Esses produtos apresentam uma vasta aplicação nos mais diversos segmentos industriais e por isso, apresentam um alto valor agregado. Perante o exposto, é de fundamental importância ter o conhecimento da massa formada para cada um desses produtos após o processo de pirólise. Para tanto, foi construída a Tabela 4.20 contendo os rendimento desses produtos após os 10 segundos de simulação.

Tabela 4.20 – Rendimento da biomassa para a simulação de 10 segundos.

$Y_{Bio-Óleo}$ [%]	$Y_{Biogás}$ [%]	$Y_{Biocarvão}$ [%]	t [s]
67,74	11,37	20,89	10

Ao examinar a Tabela 4.20, observa-se que o comportamento dos rendimentos dos produtos se assemelham ao reportado pelo trabalho de Suttibak (2017) e pela simulação de uma única partícula apresentado na seção 1.2.3. deste capítulo. O que reforça a tese do comportamento de modelos de uma única partícula relatado por Papadikis et al. (2009b), no qual afirma que esse tipo de modelagem fornece uma visão representativa de como o progresso de pirolise é controlado e preveem as conversões e rendimentos precisos dos produtos, desde que as condições de contorno sejam adequadas para um única partícula. A pequena diferença no rendimento do vapor de bio-óleo e biogás em relação ao trabalho de Suttibak (2017), ocorre devido a diferença nas condições de contorno, o que afetou o tempo de residência da fase gasosa, aumentando a fração mássica do vapor de bio-óleo e reduzindo a de biogás.

Para $1,47 \times 10^{-4}$ kg de bagaço de cana-de-açúcar introduzida no reator em 10 segundos de simulação, o cenário ótimo avaliado gerou $8,40 \times 10^{-5}$ kg de bio-óleo, $1,41 \times 10^{-5}$ kg de biogás e $2,59 \times 10^{-5}$ kg de biocarvão. Para entender como esses produtos são gerados ao longo da pirólise, construiu-se no gráfico da Figura 4.26 o comportamento desses produtos ao longo da simulação.

Ao analisar a Figura 4.26 pode-se observar que após a entrada da biomassa no tempo de um segundo, levou-se aproximadamente 0,5 segundos para o vapor de bio-óleo e de biogás começar a ser capturado na saída do reator. É possível observar que a produção do vapor do bio-óleo e biogás tendem a variar ao longo do tempo, ficando em uma média

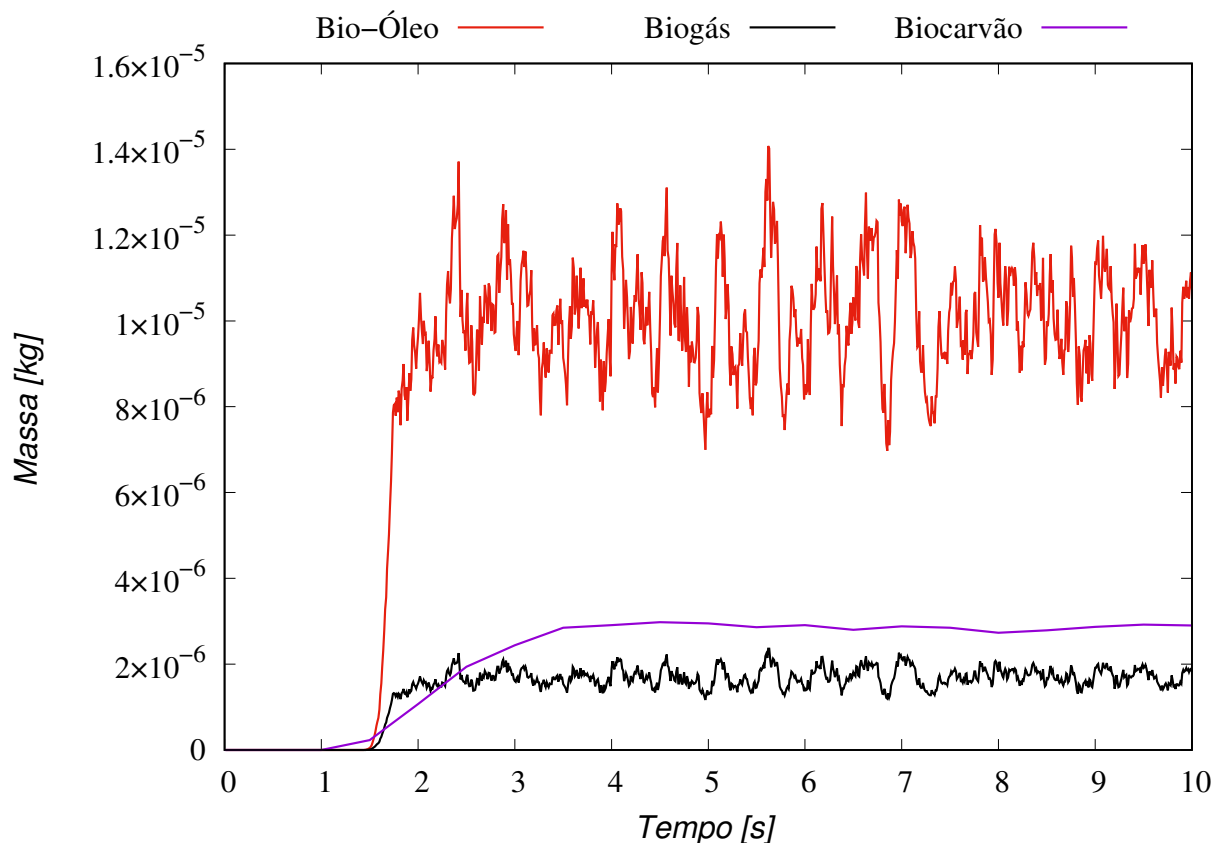


Figura 4.26 – Rendimento da biomassa para a simulação de 10 segundos.

de aproximadamente 1×10^{-5} Kg para o vapor de bio-óleo e em uma média de 1×10^{-6} Kg para o biogás. Referente ao biocarvão, observa-se que ele iniciou a sua geração no mesmo tempo que os demais componentes, porém levou mais tempo para ele atingir um equilíbrio no reator.

3.3. Temperatura

Uma vez que a temperatura é um importante parâmetro para as reações químicas que ocorrem durante a pirólise, afetando diretamente a produção do vapor do bio-óleo, do biogás e do biocarvão, apresentou-se na Figura 4.27 o comportamento da temperatura para cada uma das partículas presentes no leito de jorro.

Ao analisar o comportamento da biomassa na entrada do equipamento, nota-se que devido ao alto gradiente de temperatura, combinado com o pequeno diâmetro das partículas, o bagaço da cana-de-açúcar foi aquecido rapidamente, chegando a 600°C ainda na região anular e próximo a entrada, o que faz com que a partícula de biomassa per-

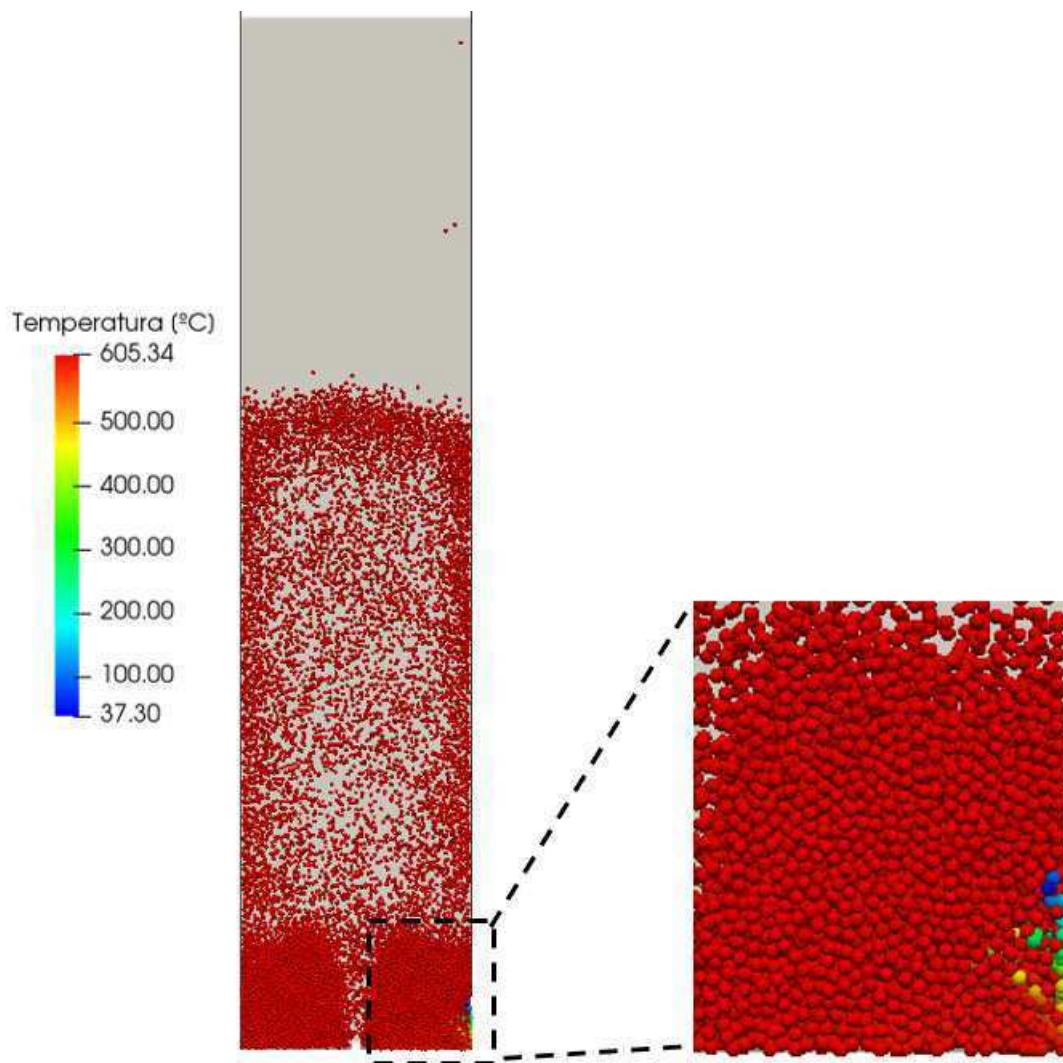


Figura 4.27 – Temperatura das partículas para a simulação de 10 segundos.

maneira no reator em alta temperatura por mais tempo, de modo a reagir toda seu material lignocelulósico. Esse comportamento ajuda a explicar a alta taxa de conversão encontrada e apresentada na Tabela 4.19. Ainda é possível observar na Figura 4.27 que as partículas de biomassa que deixam o reator saem com a mesma temperatura de operação do equipamento.

3.4. Biocarvão

Como discutido na seção 3.3. do presente capítulo, as partículas de biomassa são aquecidas rapidamente e ainda próximo a entrada atingem uma temperatura de 600°C , o que aceleram as reações da pirólise. Para verificar se as partícula do bagaço da cana-de-açúcar deixam o reator ainda com material lignocelulósico e consequentemente com

massa a ser reagida, apresentou-se na Figura 4.28 o comportamento da fração mássica do biocarvão nas partículas.

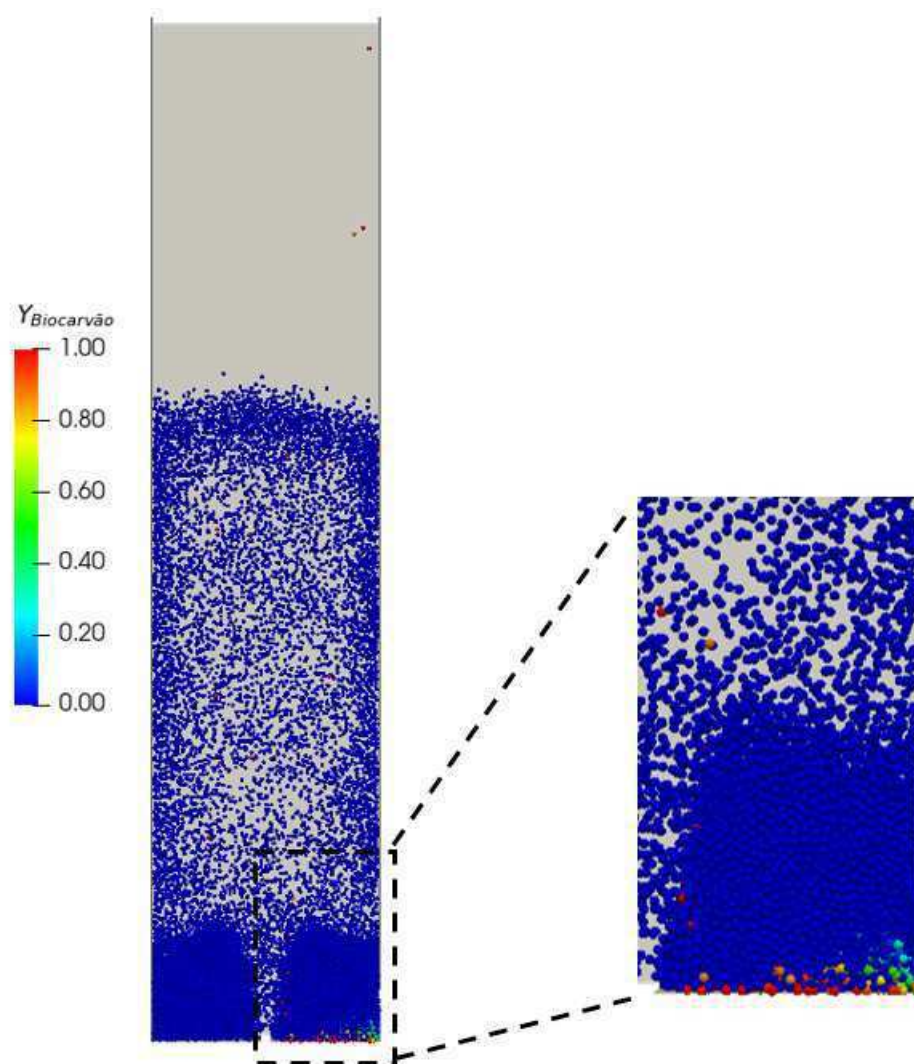


Figura 4.28 – Gráfico das interações dos efeitos.

Ao examinar a Figura 4.28, pode-se constatar que uma grande quantidade de partículas de biomassa tem seu material lignocelulósico consumido ainda quando elas ainda estão na região anular. Diante desse comportamento e do comportamento observado na temperatura, pode-se concluir que as condições de operações usadas nesse cenário permitem classificar a pirólise como do tipo flash, que segundo Basu (2018), são pirólises que ocorrem em temperatura de operação próxima a 600°C , com uma taxa de aquecimento acima de 100°C/s e apresentam um rendimento de bio-óleo em torno de 50-70%, características essas observadas nos resultados. Quando se observa a saída do reator, pode-se notar que as partículas que estão deixando o equipamento apresentam uma fração mássica de biocarvão igual a um, ou seja, elas saem sem material lignocelulótico a reagir.

Capítulo 5

Conclusões e Recomendações

1. CONCLUSÕES

Acerca dos resultados obtidos, pode-se concluir que:

- O modelo de transferência de quantidade de movimento, energia, espécie química e de turbulência acoplados com o modelo da fase discreta conseguiram representar bem o comportamento da pirólise em leito de jorro. Os resultados foram confrontados e validados com dados experimentais e de literatura.
- As simulações da celulose pura, do carvalho vermelho e do bagaço da cana-de-açúcar obtiveram resultados satisfatórios quando comparados com os dados experimentais. Mas, para isso, foi necessário ajustar as condições de contorno a partir do tempo de residência da fase gasosa. Essa correção foi imposta devido a consideração de uma única partícula no reator.
- Os resultados obtidos na simulação da celulose pura, do carvalho vermelho e do bagaço da cana-de-açúcar validaram a afirmação da literatura que o modelo de uma única partícula consegue fornecer uma visão representativa de como ocorrem o progresso da reação e que conseguem prever a conversão e os rendimentos dos produtos.
- Acerca da cinética multicomponente e multiestágio conclui-se que os fatores pré-exponenciais e as energias de ativação conseguem descrever bem o comportamento das reações. Porém, em alguns casos se faz necessário realizar correções nas razões de produção de biocarvão.

- O comportamento das partículas inertes em leito de jorro retangular foram confrontados e validados através de imagens reportadas pela literatura.
- Ao analisar o comportamento da pirólise para diferentes posicionamentos de injeção de biomassa, obteve-se que o cenário que apresentou o maior potencial de reação foi onde a entrada está localizada próxima a base do leito de jorro.
- Ainda a partir do planejamento experimental numérico, concluiu-se que o diâmetro das partículas, a temperatura do nitrogênio e a interação entre eles são os parâmetros operacionais que apresentaram a maior influência na pirólise do bagaço da cana-de-açúcar.
- Ao examinar como cada um dos parâmetros significativos influenciam na conversão, obteve-se que quanto menor o diâmetro da partícula e maior a temperatura, maior será a conversão.
- A simulação que apresentou a maior conversão de biomassa em produtos ocorreu no cenário em que foi usado uma velocidade de 142 m/s, uma temperatura de 600°C e uma diâmetro das partículas de biomassa de 1.0×10^{-3} .
- No cenário de maior conversão, a pirólise foi classificada como do tipo flash, obtendo um rendimento de 67,74% para o vapor de bio-óleo, 11,37% para o biogás e 20,89% para o biocarvão, assemelhando-se ao encontrado na simulação de uma única partícula.
- Ao analisar o cenário ótimo, observaram-se que as partículas de biomassa chegam ao equilíbrio térmico ainda na região anular e que as partículas deixam o reator com uma fração mássica de biocarvão de aproximadamente 1.

2. RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Como sugestão para trabalhos futuros, recomenda-se:

- Inserir no modelo proposto o efeito da porosidade das partículas de biomassa;
- Aplicar o modelo desenvolvido em diferentes configurações geométricas de leito de jorro;
- Estudar a pirólise em diferentes tipos de biomassa;
- Analisar o efeito do diâmetro das partículas inertes no processo de pirólise;
- Analisar o efeito da quantidade de partículas inertes sobre o processo de pirólise;
- Estudar os efeitos do aumento da vazão mássica do bagaço da cana-de-açúcar sobre a pirólise;
- Estudar os parâmetros que afetam os rendimentos do vapor de bio-óleo, do biogás e do biocarvão;

Referências Bibliográficas

- Almeida, M. B. B. d. (2008). Bio-óleo a partir da pirólise rápida, térmica ou catalítica, da palha da cana-de-açúcar e seu co-processamento com gasóleo em craqueamento catalítico. Master's thesis, UFRJ.
- Amutio, M., Lopez, G., Artetxe, M., Elordi, G., Olazar, M., and Bilbao, J. (2012). Influence of temperature on biomass pyrolysis in a conical spouted bed reactor. *Resources, Conservation and Recycling*, 59:23–31. Biomass valorization to energy and value added chemicals.
- Araujo, J. F. M. (2010). *Modelos de quebra e coalescência de gotas para o escoamento de emulsões*. PhD thesis, UFRJ.
- Basu, P. (2018). *Biomass Gasification, Pyrolysis and Torrefaction*. Elsevier.
- Batista Junior, R. (2017). Pirólise da borra de café: Cinética química e operação em leito fixo. Master's thesis, UFTM.
- Benevides, L. C. (2015). Pirólise de secagem de laranja: Análise cinética dos estágios de secagem e devolatização. Master's thesis, UFES.
- Bennett, A. (2006). *Lagrangian Fluid Dynamics*. PhD thesis, Cambridge.
- Bergman, T. L. and Lavine, A. S. (2017). *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. John Wiley Sons, New York City, New York, 8th edition edition.
- Boyce, C., Holland, D., Dennis, J., and Scott, S. (2015). Limitations on fluid grid sizing for using volume-averaged fluid equations in discrete element models of fluidized beds.
- Bradbury, A. G. W., Sakai, Y., and Shafizadeh, F. (1979). A kinetic model for pyrolysis of cellulose. *Journal of Applied Polymer Science*, 23(11):3271–3280.

- Bridgwater, A. (2012). Review of fast pyrolysis of biomass and product upgrading. *Biomass and Bioenergy*, 38:68–94. Overcoming Barriers to Bioenergy: Outcomes of the Bioenergy Network of Excellence 2003 – 2009.
- Bridgwater, A., Meier, D., and Radlein, D. (1999). An overview of fast pyrolysis of biomass. *Organic Geochemistry*, 30(12):1479–1493.
- Brownsort, P. (2009). *Biomass Pyrolysis Processes: Performance parameters and their influence on Biochar system boundaries*. PhD thesis, Biochar Research Center.
- Campbell, C. and Brennen, C. (1985). Computer simulation of granular shear flows. *J Fluid Mech*, 151.
- Campuzano, F., Brown, R. C., and Martínez, J. D. (2019). Auger reactors for pyrolysis of biomass and wastes. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 102:372–409.
- Cardoso, J., Silva, V., Eusébio, D., Brito, P., and Tarelho, L. (2018). Improved numerical approaches to predict hydrodynamics in a pilot-scale bubbling fluidized bed biomass reactor: A numerical study with experimental validation. *Energy Conversion and Management*, 156:53–67.
- Chagas, B. M. E. (2016). *Pirólise rápida da cianobactéria Spirulina para produção de biocombustíveis e químicos*. PhD thesis, UFRN.
- Chan, W.-C. R., Kelbon, M., and Krieger, B. B. (1985). Modelling and experimental verification of physical and chemical processes during pyrolysis of a large biomass particle. *Fuel*, 64(11):1505–1513.
- Chiesa, M., Mathiesen, V., Melheim, J., and Halvorsen, B. (2005). Numerical simulation of particulate flow by the eulerian–lagrangian and the eulerian–eulerian approach with application to a fluidized bed. *Computers & Chemical Engineering*, 29:291–304.
- Clissold, J., Jalalifar, S., Salehi, F., Abbassi, R., and Ghodrat, M. (2020). Fluidisation characteristics and inter-phase heat transfer on product yields in bubbling fluidised bed reactor. *Fuel*, 273:117791.
- CONAB (2022). Nova estimativa de cana-de açúcar traz produção de 572,9 milhões de toneladas.

- Crowe, C. T., Schwarzkopf, J. D., Sommerfeld, M., and Tsuji (2012). *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. CRC Press,.
- Cundall, P. A. and Strack, O. D. L. (1979). A discrete numerical model for granular assemblies. *Géotechnique*, 29(1):47–65.
- Cunha, M. E. (2017). *Caracterização de bio-óleo da pirólise da palha de cana de açúcar usando fracionamento em sistema pressurizado e cromatografia gasosa mono e bidimensional com detector de espectrometria de massa com analisador quadrupolar*. PhD thesis, UFRGS.
- Cuoci, A. (2021). Cfd modeling of gas-solid fluidized beds in openfoam: a comparison between the eulerian-eulerian and eulerian-lagrangian methods. Master's thesis, Politecnico Di Milano.
- Curtis, L. J. and Miller, D. J. (1988). Transport model with radiative heat transfer for rapid cellulose pyrolysis. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 27(10):1775–1783.
- Deen, N., Van Sint Annaland, M., Van der Hoef, M., and Kuipers, J. (2007). Review of discrete particle modeling of fluidized beds. *Chemical Engineering Science*, 62(1):28–44. Fluidized Bed Applications.
- Demirbas, A. (2007). The influence of temperature on the yields of compounds existing in bio-oils obtained from biomass samples via pyrolysis. *Fuel Processing Technology*, 88(6):591–597.
- Demirbaş, A. (2001). Biomass resource facilities and biomass conversion processing for fuels and chemicals. *Energy Conversion and Management*, 42(11):1357–1378.
- Di Blasi, C. (1994). Numerical simulation of cellulose pyrolysis. *Biomass and Bioenergy*, 7(1):87–98.
- Dong, N., Luo, K., and Wang, Q. (2017). Modeling of biomass pyrolysis in a bubbling fluidized bed reactor: Impact of intra-particle heat conduction. *Fuel Processing Technology*, 161:199–203.

- Duarte, C. R., Junior, I. P., and dos Santos, D. A. (2015). Estudo experimental e de simulação da fluidodinâmica de um leito de jorro operando em fase diluída. In *Horizonte Científico*.
- EPE (2022). Balanço energético nacional. Technical report, Ministério de Minas e Energia.
- Ergun, S. and Orning, A. A. (1949). Fluid flow through randomly packed columns and fluidized beds. *Industrial & Engineering Chemistry*, 41(6):1179–1184.
- Favero, J. L. (2014). *Simulação de escoamentos multifásicos polidispersos multivariados*. PhD thesis, UFRJ.
- Fernandes, C., Semyonov, D. A., Ferrás, L. L., and Nóbrega, J. M. (2018). Validation of the cfd-dpm solver dpmfoam in openfoam through analytical, numerical and experimental comparisons. *Granular Matter*, 20:1–18.
- Fernandez-Akarregi, A. R., Makibar, J., Lopez, G., Amutio, M., and Olazar, M. (2013). Design and operation of a conical spouted bed reactor pilot plant (25kg/h) for biomass fast pyrolysis. *Fuel Processing Technology*, 112:48–56.
- Ferreira, A. D. (2019). Estudo experimental e numérico da fluidodinâmica de um leito de jorro. Master's thesis, UFCG.
- Ferreira, M. d. F. P. (2020). *Estudo dos constituintes dos produtos de pirólise visando a produção de biocombustíveis e químicos*. PhD thesis, UFPA.
- Foong, S. Y., Liew, R. K., Yang, Y., Cheng, Y. W., Yek, P. N. Y., Wan Mahari, W. A., Lee, X. Y., Han, C. S., Vo, D.-V. N., Van Le, Q., Aghbashlo, M., Tabatabaei, M., Sonne, C., Peng, W., and Lam, S. S. (2020). Valorization of biomass waste to engineered activated biochar by microwave pyrolysis: Progress, challenges, and future directions. *Chemical Engineering Journal*, 389:124401.
- Freitas, G. M. (2016). Biomassa, uma fonte de energia.
- Gonçalves, E. V. (2016). Pirólise do bagaço de cana-de-açúcar em reator de leito fixo: Efeito de parâmetros de processo no rendimento e na qualidade do bio-óleo, do carvão e dos gases gerados. Master's thesis, UEM.

- Gui, N., Yang, X., Jiang, S., and Tu, J. (2019). *Gas-Particle and Granular Flow Systems: Coupled Numerical Methods and Applications*. Elsevier.
- Gunn, D. (1978). Transfer of heat or mass to particles in fixed and fluidised beds. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 21(4):467–476.
- Hameed, S., Sharma, A., Pareek, V., Wu, H., and Yu, Y. (2019). A review on biomass pyrolysis models: Kinetic, network and mechanistic models. *Biomass and Bioenergy*, 123:104–122.
- Hoomans, B., Kuipers, J., Briels, W., and van Swaaij, W. (1996). Discrete particle simulation of bubble and slug formation in a two-dimensional gas-fluidised bed: A hard-sphere approach. *Chemical Engineering Science*, 51(1):99–118.
- Hooshdaran, B., Haghshenasfard, M., Hosseini, S. H., Esfahany, M. N., Lopez, G., and Olazar, M. (2021). Cfd modeling and experimental validation of biomass fast pyrolysis in a conical spouted bed reactor. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 154:105011.
- Hu, C., Luo, K., Wang, S., Sun, L., and Fan, J. (2019a). Computational fluid dynamics/discrete element method investigation on the biomass fast pyrolysis: The influences of shrinkage patterns and operating parameters. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 58(3):1404–1416.
- Hu, C., Luo, K., Wang, S., Sun, L., and Fan, J. (2019b). Computational fluid dynamics/discrete element method investigation on the biomass fast pyrolysis: The influences of shrinkage patterns and operating parameters. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 58(3):1404–1416.
- Ishii, M. and Hibiki, T. (2011). *Thermo-fluid dynamics of two-phase flow. With a foreword by Lefteri H. Tsoukalas. 2nd ed.*
- Jahirul, M. I., Rasul, M. G., Chowdhury, A. A., and Ashwath, N. (2012). Biofuels production through biomass pyrolysis —a technological review. *Energies*, 5(12):4952–5001.

- Jalalifar, S., Abbassi, R., Garaniya, V., Hawboldt, K., and Ghiji, M. (2018). Parametric analysis of pyrolysis process on the product yields in a bubbling fluidized bed reactor. *Fuel*, 234:616–625.
- Jesus, N. A. L. d. (2017). *Biomassas alternativas para a produção de bio-óleo por pirólise catalisada*. PhD thesis, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.
- Kafui, K., Thornton, C., and Adams, M. (2002). Discrete particle-continuum fluid modelling of gas–solid fluidised beds. *Chemical Engineering Science*, 57(13):2395–2410.
- Kan, T., Strezov, V., and Evans, T. J. (2016). Lignocellulosic biomass pyrolysis: A review of product properties and effects of pyrolysis parameters. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 57:1126–1140.
- Klass, D. (1998). *Biomass for renewable energy, fuels, and chemicals*. Academic Press,.
- Koufopoulos, C. A., Lucchesi, A., and Maschio, G. (1989). Kinetic modelling of the pyrolysis of biomass and biomass components. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 67(1):75–84.
- Koufopoulos, C. A., Papayannakos, N., Maschio, G., and Lucchesi, A. (1991). Modelling of the pyrolysis of biomass particles. studies on kinetics, thermal and heat transfer effects. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 69(4):907–915.
- Laird, D., Brown, R., Amonette, J., and Lehmann, J. (2009). Review of the pyrolysis platform for coproducing bio-oil and biochar. *Biofuels, Bioproducts and Biorefining*, 3:547 – 562.
- Lazzari, E. (2014). Pirólise de resíduos agroindústrias da manga: análise cromatográfica do bio-óleo. Master’s thesis, UFRGS.
- Li, J. and Mason, D. (2000). A computational investigation of transient heat transfer in pneumatic transport of granular particles. *Powder Technology*, 112(3):273–282.
- Li, T., Gopalakrishnan, P., Garg, R., and Shahnam, M. (2012). Cfd–dem study of effect of bed thickness for bubbling fluidized beds. *Particuology*, 10(5):532–541.

- Liden, A., Berruti, F., and Scott, D. (1988). A kinetic model for the production of liquids from the flash pyrolysis of biomass. *Chemical Engineering Communications*, 65(1):207–221.
- Limtrakul, S., Boonsrirat, A., and Vatanatham, T. (2004). Dem modeling and simulation of a catalytic gas-solid fluidized bed reactor: A spouted bed as a case study. *Chemical Engineering Science*, 59:5225–5231.
- Lujang, X., Jiang, L.-Q., Zhang, H., Fang, Z., and Jr, R. (2020). *Introduction to Pyrolysis as a Thermo-Chemical Conversion Technology*, pages 3–30.
- Lv, P., Xiong, Z., Chang, J., Wu, C., Chen, Y., and Zhu, J. (2004). An experimental study on biomass air–steam gasification in a fluidized bed. *Bioresource Technology*, 95(1):95–101.
- Malghani, S., Gleixner, G., and Trumbore, S. E. (2013). Chars produced by slow pyrolysis and hydrothermal carbonization vary in carbon sequestration potential and greenhouse gases emissions. *Soil Biology and Biochemistry*, 62:137–146.
- Marafon, A. C., Santiago, A. D., Amaral, A. F. C., Bierhals, A. N., Paiva, H. L., and Guimarães, V. d. S. (2016). Uso da biomassa para geração de energia. Technical report, EMBRAPA.
- Marcilla, A., Catalá, L., García-Quesada, J., Valdés, F., and Hernández, M. (2013). A review of thermochemical conversion of microalgae. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 27:11–19.
- Mazlan, M. A. F., Uemura, Y., Osman, N. B., and Yusup, S. (2015). Fast pyrolysis of hardwood residues using a fixed bed drop-type pyrolyzer. *Energy Conversion and Management*, 98:208–214.
- McCree, K. (1971). The action spectrum, absorptance and quantum yield of photosynthesis in crop plants. *Agricultural Meteorology*, 9:191–216.
- McNamara, S. and Young, W. (1992). Inelastic collapse and clumping in a one-dimensional granular medium. *Physics of Fluids - PHYS FLUIDS*, 4:496–504.

- Miller, R. and Bellan, J. (1997). A generalized biomass pyrolysis model based on superimposed cellulose, hemicellulose and lignin kinetics. *Combustion Science and Technology*, 126(1-6):97–137.
- Miranda, M. R. S. (2017). *Investigação da pirólise de biomassa do cerrado para aplicação à sistemas de gaseificação estagiada*. PhD thesis, UNB.
- Moghadam, R. A., Yusup, S., Azlina, W., Nehzati, S., and Tavasoli, A. (2014). Investigation on syngas production via biomass conversion through the integration of pyrolysis and air–steam gasification processes. *Energy Conversion and Management*, 87:670–675.
- Mohan, D., Pittman, C., and Steele, P. (2006). Pyrolysis of wood/biomass for bio-oil: A critical review. *Energy*, 20:848–.
- Moreira, R. (2015). *Estudo da pirólise lenta da casca da castanha de caju*. Master’s thesis, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares.
- Mullen, C. A., Boateng, A. A., Goldberg, N. M., Lima, I. M., Laird, D. A., and Hicks, K. B. (2010). Bio-oil and bio-char production from corn cobs and stover by fast pyrolysis. *Biomass and Bioenergy*, 34(1):67–74.
- Müller, C. R., Scott, S. A., Holland, D. J., Clarke, B. C., Sederman, A. J., Dennis, J. S., and Gladden, L. F. (2009). Validation of a discrete element model using magnetic resonance measurements. *Particuology*, 7(4):297–306. From micro-scale to technical dimension - Challenges in the simulation of dense gas-particle flows.
- Norouzi, H. R., Zarghami, R., Sotudeh-Gharebagh, R., and Mostoufi, N. (2019). *Coupled CFD-DEM Modeling: Formulation, Implementation and Application to Multiphase Flows*. Elsevier.
- Orellana, B. B. M. A. (2019). *Utilização de resíduos de biomassa do distrito federal para fins energéticos*. PhD thesis, UNB.
- Papadikis, K., Gerhauser, H., Bridgwater, A., and Gu, S. (2009a). Cfd modelling of the fast pyrolysis of an in-flight cellulosic particle subjected to convective heat transfer. *Biomass and Bioenergy*, 33(1):97–107.

- Papadikis, K., Gu, S., and Bridgwater, A. (2009b). Cfd modelling of the fast pyrolysis of biomass in fluidised bed reactors: Modelling the impact of biomass shrinkage. *Chemical Engineering Journal*, 149(1):417–427.
- Papadikis, K., Gu, S., and Bridgwater, A. (2010a). 3d simulation of the effects of sphericity on char entrainment in fluidised beds. *Fuel Processing Technology*, 91(7):749–758.
- Papadikis, K., Gu, S., and Bridgwater, A. (2010b). Computational modelling of the impact of particle size to the heat transfer coefficient between biomass particles and a fluidised bed. *Fuel Processing Technology*, 91(1):68–79.
- Papadikis, K., Gu, S., Bridgwater, A., and Gerhauser, H. (2009c). Application of cfd to model fast pyrolysis of biomass. *Fuel Processing Technology*, 90(4):504–512.
- Park, H. C. and Choi, H. S. (2019a). Fast pyrolysis of biomass in a spouted bed reactor: Hydrodynamics, heat transfer and chemical reaction. *Renewable Energy*, 143:1268–1284.
- Park, H. C. and Choi, H. S. (2019b). Fast pyrolysis of biomass in a spouted bed reactor: Hydrodynamics, heat transfer and chemical reaction. *Renewable Energy*, 143:1268–1284.
- Peng, F., Peng, P., Xu, F., and Sun, R.-C. (2012). Fractional purification and bioconversion of hemicelluloses. *Biotechnology Advances*, 30(4):879–903. Biorefining: Thermochemical and Enzymatic Biomass Conversion.
- Ribeiro, L. A. B. (2015). Melhoria do líquido obtido por pirólise rápida de serragem de eucalipto por meio de misturas para utilização como combustível. Master's thesis, UNICAMP.
- Rowell, R. (2012). *Handbook of Wood Chemistry and Wood Composites*. CRC Press,.
- Ruiz, E. T. N. F. (2015). *Análise de investimento em projetos Greenfield de bioenergia*. Alínea,.
- Rusche, H. (2002). *Computational fluid dynamics of dispersed two-phase flow at high phase fractions*. PhD thesis, Imperial College of science.

- Schena, T. (2019). *Aproveitamento dos resíduos de coco através da pirólise: Uma abordagem analítica e econômica*. PhD thesis, UFRGS.
- Schwieder, A. (2012). *Analysis of technical and economic feasibility of using bio-oil in the decentralized generation of electricity as an alternative to fossil fuel use. 2012. 29 f. Specialization monograph. (Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul), Porto Alegre. Análise da viabilidade técnico-econômica da utilização de bio-óleo na geração descentralizada de energia elétrica como alternativa à utilização de combustíveis fósseis*. PhD thesis.
- Sharma, A., Pareek, V., and Zhang, D. (2015). Biomass pyrolysis—a review of modelling, process parameters and catalytic studies. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 50:1081–1096.
- Sharuddin, S. D. A., Abnisa, F., Wan Daud, W. M. A., and Aroua, M. K. (2016). A review on pyrolysis of plastic wastes. *Energy Conversion and Management*, 115:308–326.
- Silva, L. F. L. R. (2008). *Desenvolvimento de metodologia para simulação de escoamento polidisperso usando código livre*. PhD thesis, UFRJ.
- Silvério, F. O., Barbosa, L. C. A., Gomide, J. L., Reis, F. P., and Velosa, D. P. (2006). Metodologia de extração e determinação do teor de extrativos em madeiras de eucalipto. *Revista Árvore*, 30:109–116.
- Smagorinsky, J. (1963). General circulation experiments with the primitive equations: I. the basic experiment. *Monthly Weather Review*, 91(3):99 – 164.
- Sobek, S. and Werle, S. (2019). Solar pyrolysis of waste biomass: Part 1 reactor design. *Renewable Energy*, 143:1939–1948.
- Suttibak, S. (2017). Influence of reaction temperature on yields of bio-oil from fast pyrolysis of sugarcane residues. *Engineering and Applied Science Research*, 44:142–147.
- Toscano Miranda, N., Lopes Motta, I., Maciel Filho, R., and Wolf Maciel, M. R. (2021). Sugarcane bagasse pyrolysis: A review of operating conditions and products properties. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 149:111394.

- Tripathi, M., Sahu, J., and Ganesan, P. (2016). Effect of process parameters on production of biochar from biomass waste through pyrolysis: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 55:467–481.
- Tsuji, Y., Kawaguchi, T., and Tanaka, T. (1993). Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed. *Powder Technology*, 77(1):79–87.
- van der Hoef, M., Ye, M., van Sint Annaland, M., Andrews, A., Sundaresan, S., and Kuipers, J. (2006). Multiscale modeling of gas-fluidized beds. In Marin, G. B., editor, *Computational Fluid Dynamics*, volume 31 of *Advances in Chemical Engineering*, pages 65–149. Academic Press.
- Versteeg, H. K. and Malalasekera, W. (2007). *An introduction to computational fluid dynamics*. Pearson Prentice Hall, Harlow.
- Vikram, S., Rosha, P., and Kumar, S. (2021). Recent modeling approaches to biomass pyrolysis: A review. *Energy & Fuels*, 35(9):7406–7433.
- von Berg, L., Soria-Verdugo, A., Hochenauer, C., Scharler, R., and Anca-Couce, A. (2020). Evaluation of heat transfer models at various fluidization velocities for biomass pyrolysis conducted in a bubbling fluidized bed. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 160:120175.
- Ward, S. and Braslaw, J. (1985). Experimental weight loss kinetics of wood pyrolysis under vacuum. *Combustion and Flame*, 61(3):261–269.
- Xiong, Q., Aramideh, S., and Kong, S.-C. (2013a). Modeling effects of operating conditions on biomass fast pyrolysis in bubbling fluidized bed reactors. *Energy & Fuels*, 27(10):5948–5956.
- Xiong, Q., Aramideh, S., and Kong, S.-C. (2014). Assessment of devolatilization schemes in predicting product yields of biomass fast pyrolysis. *Environmental Progress & Sustainable Energy*, 33(3):756–761.
- Xiong, Q., Kong, S.-C., and Passalacqua, A. (2013b). Development of a generalized numerical framework for simulating biomass fast pyrolysis in fluidized-bed reactors. *Chemical Engineering Science*, 99:305–313.

- Xu, H., Zhong, W., Yuan, Z., and Yu, A. (2016). Cfd-dem study on cohesive particles in a spouted bed. *Powder Technology*, 314:377–386. Special Issue on Simulation and Modelling of Particulate Systems.
- Xue, Q., Dalluge, D., Heindel, T., Fox, R., and Brown, R. (2012). Experimental validation and cfd modeling study of biomass fast pyrolysis in fluidized-bed reactors. *Fuel*, 97:757–769.
- Xue, Q., Heindel, T., and Fox, R. (2011). A cfd model for biomass fast pyrolysis in fluidized-bed reactors. *Chemical Engineering Science*, 66:2440–2452.
- Yang, S., Dong, R., Du, Y., Wang, S., and Wang, H. (2021a). Numerical study of the biomass pyrolysis process in a spouted bed reactor through computational fluid dynamics. *Energy*, 214:118839.
- Yang, S., Wan, Z., Wang, S., and Wang, H. (2021b). Reactive mp-pic investigation of heat and mass transfer behaviors during the biomass pyrolysis in a fluidized bed reactor. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 9(2):105047.
- Yeoh, G. H. and Tu, J. (2019). *Computational techniques for multiphase flows*. Butterworth-Heinemann.
- Çavuş, V., Şahin, S., Esteves, B., , and Ayata, U. (2019). Determination of thermal conductivity properties in some wood species obtained from turkey. *BioRes.*, 14(3):6709–6715.