

VITOR ALBERTO LEMES MONTEIRO

**SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL FLUIDODINÂMICA E
TERMOQUÍMICA DE REATOR EM LEITO FLUIDIZADO
DESTINADO A GASEIFICAÇÃO DE COMBUSTÍVEL
DERIVADO DE RESÍDUOS SÓLIDOS URBANOS**



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA

2024

VITOR ALBERTO LEMES MONTEIRO

**SIMULAÇÃO FLUIDODINÂMICA E TERMOQUÍMICA DE REATOR EM
LEITO FLUIDIZADO DESTINADO À GASEIFICAÇÃO DE
COMBUSTÍVEL DERIVADO DE RESÍDUOS SÓLIDOS URBANOS**

Tese a ser apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia, como parte dos requisitos para a obtenção do título de **DOUTOR EM ENGENHARIA MECÂNICA**.

Área de Concentração: Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos

Orientador: Prof. Dr. Solidônio R. de Carvalho

UBERLÂNDIA – MG

2024

Ficha Catalográfica Online do Sistema de Bibliotecas da UFU
com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).

M775 2024	Monteiro, Vitor Alberto Lemes, 1992- SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL FLUIDODINÂMICA E TERMOQUÍMICA DE REATOR EM LEITO FLUIDIZADO DESTINADO A GASEIFICAÇÃO DE COMBUSTÍVEL DERIVADO DE RESÍDUOS SÓLIDOS URBANOS [recurso eletrônico] / Vitor Alberto Lemes Monteiro. - 2024. Orientador: Solidônio Rodrigues de Carvalho. Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Uberlândia, Pós-graduação em Engenharia Mecânica. Modo de acesso: Internet. Disponível em: http://doi.org/10.14393/ufu.te.2024.670 Inclui bibliografia. 1. Engenharia mecânica. I. Carvalho, Solidônio Rodrigues de, 1978-, (Orient.). II. Universidade Federal de Uberlândia. Pós-graduação em Engenharia Mecânica. III. Título. CDU: 621
--------------	---

Bibliotecários responsáveis pela estrutura de acordo com o AACR2:

Gizele Cristine Nunes do Couto - CRB6/2091
Nelson Marcos Ferreira - CRB6/3074



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Engenharia
Mecânica

Av. João Naves de Ávila, nº 2121, Bloco 1M, Sala 212 - Bairro Santa Mônica, Uberlândia-
MG, CEP 38400-902

Telefone: (34) 3239-4282 - www.posmecanicaufu.com.br - secposmec@mecanica.ufu.br



ATA DE DEFESA - PÓS-GRADUAÇÃO

Programa de Pós-Graduação em:	Engenharia Mecânica				
Defesa de:	Tese de Doutorado; nº 388; PPGEM				
Data:	30/08/2024	Hora de início:	09:00	Hora de encerramento:	12:00
Matrícula do Discente:	11923EMC019				
Nome do Discente:	Vitor Alberto Lemes Monteiro				
Título do Trabalho:	Simulação computacional fluidodinâmica e termoquímica de reator em leito fluidizado destinado a gaseificação de combustível derivado de resíduos sólidos urbanos.				
Área de concentração:	Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos				
Linha de pesquisa:	Geração e Conservação de Energia				
Projeto de Pesquisa de vinculação:	Edital Nº 040/2022 - FAPEMIG - Produção de energia térmica e elétrica a partir de resíduos sólidos: estruturação de uma usina termoquímica experimental no campus Glória da UFU.				

Reuniu-se por videoconferência, a Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, assim composta: Prof. Dr. João Marcelo Vedovoto - UFU; Prof. Dr. Francisco José de Souza - UFU; Prof. Dr. Júlio César Passos - UFSC; Prof. Dr. Diego Mauricio Yepes Maya - UNIFEI e Prof. Dr. Solidônio Rodrigues de Carvalho - UFU, orientador do candidato.

Iniciando os trabalhos o presidente da mesa, Dr. Solidônio Rodrigues de Carvalho, apresentou a Comissão Examinadora e o candidato, agradeceu a presença do público, e concedeu ao Discente a palavra para a exposição do seu trabalho. A duração da apresentação do Discente e o tempo de arguição e resposta foram conforme as normas do Programa.

A seguir, o senhor presidente concedeu a palavra, pela ordem sucessivamente, aos examinadores, que passaram a arguir o candidato. Ultimada a arguição, que se desenvolveu dentro dos termos regimentais, a Banca, em sessão secreta, atribuiu o resultado final, considerando o candidato:

Aprovado.

Esta defesa faz parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor.

O competente diploma será expedido após cumprimento dos demais requisitos, conforme as normas do Programa, a legislação pertinente e a regulamentação

interna da UFU.

Nada mais havendo a tratar foram encerrados os trabalhos. Foi lavrada a presente ata que após lida e achada conforme foi assinada pela Banca Examinadora.



Documento assinado eletronicamente por **Solidonio Rodrigues de Carvalho, Professor(a) do Magistério Superior**, em 30/08/2024, às 12:02, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **João Marcelo Vedovotto, Professor(a) do Magistério Superior**, em 30/08/2024, às 12:02, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Francisco José de Souza, Professor(a) do Magistério Superior**, em 30/08/2024, às 12:02, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Diego Mauricio Yepes Maya, Usuário Externo**, em 30/08/2024, às 12:03, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Júlio César Passos, Usuário Externo**, em 30/08/2024, às 12:05, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **5625372** e o código CRC **44FE5EE1**.

DEDICATÓRIA

Com muito esmero, dedico este trabalho a minha mãe, **Cibele**. Se nele há mérito, ela a maior merecedora.

"A verdade é filha do tempo e não da autoridade, mas a dúvida é o começo da sabedoria." - Galileu Galilei

"O temor do Senhor é o princípio da sabedoria, e o conhecimento do Santo é entendimento." - Provérbios 9:10

"O humano lambari se afunda no mergulho do conhecimento abissal com seu trampolim científico: afoga sua alma numa piscina de bolinha" - Monteiro, V.

AGRADECIMENTOS

Agradeço, sobretudo, a Deus, pela saúde, disposição e força para enfrentar os momentos difíceis, mas que sempre geram aprendizado e superação. Agradeço também por plantar em mim o enorme gosto e interesse pela engenharia.

Expresso meus sinceros agradecimentos a todos que participaram, direta ou indiretamente, da realização deste trabalho, principalmente:

- Ao Prof. Solidônio R. de Carvalho pela orientação, amizade, disposição e atenção ao longo da realização deste trabalho.
- Aos professores Valério L. Borges, Alam G. Trovó, Washington M. S. Júnior e Marcelo Braga que contribuíram nos estudos relacionados à linha de pesquisa em gaseificação.
- Ao Diretor Técnico Luciano R. Infesta – Carbogás Energia Ltda. – pela atenção quando do projeto em parceria, que possibilitaram o desenvolvimento do Projeto P&D que originou este trabalho.
- Agradeço as companhias brasileiras: Furnas Centrais Elétricas S.A. e Carbogás Energia Ltda., assim como as agências governamentais ANEEL, CAPES, CNPq e FAPEMIG pelo suporte financeiro.
- Aos doutores Cassius R. N. Ferreira, Maurício G. A. dos Reis, José Silvio e Valdislaine M. da Silva pelo companheirismo e pelo grande aprendizado alcançados juntos.
- À Universidade Federal de Uberlândia e à Faculdade de Engenharia Mecânica pela estrutura física e organizacional de um dos melhores programas de pós-graduação do país, que possibilitaram minha formação nos últimos anos.

MONTEIRO, V. A. L. **Simulação Computacional Fluidodinâmica e Termoquímica de Reator em Leito Fluidizado Destinado a Gaseificação de Combustível Derivado de Resíduos Sólidos Urbanos**. 2024. 256 p. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, Brasil.

Resumo

Diante da problemática inserida no tema da sustentabilidade referente à destinação do lixo urbano, produzido mundialmente em ritmo acelerado, apresenta-se diversas tratativas e tecnologias voltadas para a recuperação energética de resíduos de descarte, as chamadas tecnologias *Waste-to-Energy*. Nesse contexto, as tecnologias envolvendo a gaseificação em leito fluidizado assumem grande destaque nos trabalhos acadêmicos e em desenvolvimentos laboratoriais. Contudo, sua experimentação física, sobretudo, envolvendo resíduos nocivos à saúde e ao meio ambiente, é restrita, onerosa e de alto risco.

O presente trabalho objetivou desenvolver um modelo computacional capaz de reproduzir a experimentação física de um reator real de gaseificação em larga escala. O modelo CFD desenvolvido mostrou-se capaz de replicar de forma coerente os resultados obtidos nos experimentos físicos, permitindo inferências valiosas sobre o escoamento fluidodinâmico com análise detalhada, custo-efetiva do comportamento do equipamento e os processos termoquímicos envolvidos na gaseificação.

Os principais resultados incluem o mapeamento dos regimes de fluidização e a determinação do regime na Planta Piloto de Mauá-SP usando apenas dados operacionais, além da identificação das zonas de reações químicas. Do ponto de vista da aplicação da CFD, a abordagem Euleriana-Euleriana foi eficaz para estudar a fluidização em larga escala, oferecendo precisão com custo computacional reduzido, podendo ser aplicada em reatores maiores sem aumento excessivo da complexidade da malha computacional.

A pesquisa avançou na compreensão teórica da gaseificação e demonstrou a aplicabilidade prática de modelos computacionais para melhorar tecnologias industriais sustentáveis.

Palavras chave: Gaseificação em escala industrial. Abordagem euleriana. Escoamento multifásico. Semi-industrial. Waste-to-Energy.

MONTEIRO, V. A. L. ***Computational Fluid Dynamics and Thermochemical Simulation of a Fluidized Bed Reactor Designed for the Gasification of Refuse Derived Fuel from Municipal Solid Waste***. 2024. 256 p. PhD Thesis, Federal University of Uberlândia, Uberlândia, Brazil.

Abstract

Faced with the issue of sustainability regarding the disposal of urban waste, produced worldwide at a rapid pace, several approaches and technologies are presented aimed at energy recovery from discarded waste, the so-called Waste-to-Energy technologies. In this context, technologies involving fluidized bed gasification assume great prominence in academic work and laboratory developments. However, its large-scale physical experimentation, especially involving waste that can produce gases and other harmful effects on health and the environment, is restricted, costly and high risk.

The present work aimed to develop a computational model capable of reproducing the physical experimentation of a real large-scale gasification reactor. The developed CFD model proved capable of coherently replicating the results obtained in physical experiments, allowing valuable inferences about the fluid dynamic flow with detailed, cost-effective analysis of the equipment's behavior and the thermochemical processes involved in gasification.

The main results include the mapping of fluidization regimes and the determination of the regime at the Mauá SP Pilot Plant using only operational data, in addition to the identification of chemical reaction zones. From the point of view of CFD application, the Eulerian-Eulerian approach was effective for studying fluidization on a large scale, offering precision with reduced computational cost, and can be applied to larger reactors without excessively increasing the complexity of the computational mesh.

The research advanced the theoretical understanding of gasification and demonstrated the practical applicability of computational models to improve sustainable industrial technologies.

Keywords: Industrial scale gasification. Eulerian approach. Multiphase-flow. Semi-industrial. Waste-to-Energy.

LISTA DE SÍMBOLOS E SIGLAS

No presente trabalho, foram preservadas diversas nomenclaturas e siglas na língua inglesa por critérios de maior compatibilização com a linguagem utilizada nos artigos científicos relacionados. Buscando dessa forma melhor intercambialidade com nomes de biomassas, processos de gaseificação diversos, termos da sustentabilidade altamente difundidos e parâmetros com nomes originalmente em inglês presentes inalterados em diversas línguas, inclusive a língua portuguesa.

Símbolos Latinos:

A_d	Área de seção transversal do reator relativo ao seu diâmetro
A_s	Coeficiente empírico
A_{sp}	Área superficial por unidade de volume de fase sólida
E_a	Energia de Ativação
J_s	Termo fonte/sumidouro de energia granular de origem dinâmica interativa
K_{drag}	<i>Coeficiente de arrasto</i>
P_i	Pressão parcial da i -ésima espécie química
$P_{s,f}$	Pressão (granular) friccional
P_s	Pressão granular
T^*	Temperatura de transferência de fase
T_s	Temperatura de Sutherland
g_{0_s}	Função de distribuição radial
k_f	Tensão de coesão
$\dot{m}$	Vazão mássica
$\dot{q}$	Termo fonte de energia térmica da fase
h	Coeficiente convectivo
Δp	Diferença de pressão (do inglês, <i>pressure drop</i>)
A	Fator de Frequência ou Constante pré-exponencial
C	Coeficientes empíricos
Co	Número de Courant
D	Difusividade
E	Entalpia
G	Taxa de produção de energia cinética turbulenta
I	Termo de transferência de quantidade de movimento entre fases ou Matriz Identidade
MM	Massa Molar
Nu	Número de Nusselt
PCI	Poder Calorífico Inferior

Pr	Número de Prandtl
Q	Energia térmica
R	Taxa de reação química ou Constante do gás
Re	Número de Reynolds
S	Tensor de deformações da fase
T	Temperatura
U ou u	velocidade
V	Volume
Y	fração volumétrica da espécie
d	Diâmetro
e	Coeficiente de restituição
g	Aceleração gravitacional
m	massa
n	Coeficiente estequiométrico
p	pressão
κ	Energia cinética turbulenta

Símbolos Gregos:

μ_{eff_s}	Viscosidade granular efetiva
κ_{eff}	Condutividade térmica efetiva
λ_s	Viscosidade granular aparente (do inglês, <i>bulk viscosity</i>)
μ_{eff}	Viscosidade efetiva
$\mu_{s,f}$	Viscosidade (granular) friccional
$\sigma_{s,f}$	Tensão normal de fricção
φ_f	Ângulo de fricção
α	<i>Fração volumétrica da fase</i>
β	Expoente de temperatura
γ	Dissipação de energia granular
ε	Dissipação viscosa de energia cinética turbulenta
η	Eficiência
θ	Temperatura granular
λ	Viscosidade aparente
μ	Viscosidade dinâmica
ν	Viscosidade cinemática
ρ	Massa específica da fase
σ	Tensão viscosa
τ	Tensor de tensões ou tempo (escala de tempo)
φ	Esfericidade de partículas
ϵ	Fração de vazio (do inglês, <i>voidage</i>)
ϕ	Dissipação viscosa ou fluxo volumétrico sobre a face do volume finito

Índices

<i>het</i>	Referente à(s) reações Heterogêneas
<i>hom</i>	Referente à(s) reações Homogêneas
<i>IN</i>	de 'Entrada'
<i>OUT</i>	de 'Saída'
<i>a</i>	Referente à partícula sólida (de biomassa ou de areia)
<i>air</i>	Referente ao ar (<i>air</i>)
<i>bed</i>	Referente ao leito (<i>bed</i>)
<i>bio</i> ou <i>biomassa</i>	Referente à biomassa
<i>dev</i>	Referente à Devolatilização
<i>diff</i>	De 'difusiva' (do inglês, <i>diffusive</i>)
<i>eff</i>	Efetiva(o)
<i>f</i>	Atributo 'de fricção'
<i>g</i>	Índice para fase gasosa
<i>i</i>	<i>i</i> -ésima espécie química ou 'intersticial'
<i>i, k</i>	Propriedade da <i>i</i> -ésima espécie da fase <i>k</i>
<i>k</i>	Índice da <i>k</i> -ésima fase
<i>kin</i>	de 'cinética' (do inglês, <i>kinetics</i>)
<i>máx</i>	Atributo máximo
<i>mf</i>	Atributo "mínimo de fluidização"
<i>min</i>	Atributo mínimo
<i>p</i>	Índice da espécie Partícula (geralmente atribuída para biomassa)
$p \rightarrow i, k$	de 'partícula de biomassa convertido na <i>i</i> -ésima espécie da <i>k</i> -ésima fase
<i>particles</i>	Referente à partícula (de biomassa)
<i>s</i>	Índice atribuído para a(s) fase(s) sólida(s) ou de 'superficial'
<i>sand</i>	Referente à areia (<i>sand</i>)
<i>syngas</i>	Referente ao gás de síntese (<i>syngas</i>)

Operadores matemáticos:

∇^2	Laplaciano
$\square^T$	Transposta
$\frac{\partial}{\partial t}$	Derivação temporal
:	Produto interno duplo
@	Estado termodinâmico de Temperatura e/ou de Pressão
*	Multiplicação escalar
.	Produto interno
∇	Operador gradiente
$\nabla \cdot$	Operador divergente
$\propto$	Proporcional
wt%	Porcentagem em peso

Siglas e abreviaturas:

BFB	<i>Bubbling Fluidized Bed</i> (Leito Fluidizado Borbulhante)
EU-EU	Abordagem Euleriana-Euleriana
EU-LA	Abordagem Euleriana-Lagrangeana
CCE	<i>Carbon Conversion Efficiency</i> (Eficiência de Conversão de Carbono)
CGM	<i>Coarse Grain Method</i> (Método Granular Grosseiro)
CGE	<i>Cold Gas Efficiency</i> (Eficiência de Gaseificação)
CDR	Combustível Derivado de Resíduos
CDRSU	Combustível Derivado de Resíduos Sólidos Urbanos
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i> (Computação Fluidodinâmica)
DNS	<i>Direct Numeric Simulation</i> (Simulação Numérica Direta)
DEM	<i>Discrete Element Method</i>
DPM	<i>Discrete Particle Method</i>
DKM	<i>Distribution Kernel Method</i>
DCFB	<i>Dual Circulating Fluidized Bed</i> (Leito Fluidizado Duplamente Circulante)
EMMS	Energy Minimization Multi-Scale
EF	<i>Equivalence/Efficiency Ratio</i> (Razão de Equivalência/Eficiência)
GLP	Gás Liquefeito de Petróleo
GN	Gás Natural
IDH	Índice de Desenvolvimento Humano
KTGF	<i>Kinetic Theory of Granular Flow</i>
LTCM	Laboratório de Transferência de Calor e Massa
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>
LHV	<i>Lower Heating Value</i> (Poder Calorífico Inferior)
MP-PIC	<i>Multi-phase Particle-in-cell</i>
SOx	Óxidos de enxofre
NOx	Óxidos de nitrogênio
PSD	<i>Particle Size Distribution</i> (Distribuição de tamanho de partículas)
P&D	Pesquisa e Desenvolvimento
PCI	Poder Calorífico Inferior
PNRS	Política Nacional de Resíduos Sólidos
RDT	<i>Rapid Distortion Theory</i> (Teoria da Distorção Rápida)
RAC	Razão de Ar/Combustível
RNA	Redes Neurais Artificiais
RDF	<i>Refuse Derived Fuel</i> (por vezes traduzido na literatura por Combustível Derivado de Resíduo)
RSU	Resíduos Sólidos Urbanos
RANS	<i>Reynolds-Averaged Navier-Stokes</i>
SP	São Paulo
S/B	<i>Steam/Biomassa</i> (Razão de Vapor/Biomassa)
TFM	<i>Two Fluid Model</i>
UFU	Universidade Federal de Uberlândia
UTGE	Usina Termoquímica de Geração de Energia
VOF	<i>Volume of Fluid</i>
WTE	<i>Waste-to-Energy</i> (Tecnologias Resíduo para Energia)

SUMÁRIO

1. CAPÍTULO I.....	1
INTRODUÇÃO	1
1.1. Motivação.....	1
1.2. Objetivos	2
1.3. Objetivos Específicos	2
1.4. Justificativa	3
2. CAPÍTULO II.....	5
REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	5
2.1. Gaseificação e o Fenômeno da Fluidização	6
2.2. Gaseificação de larga escala em Leito Fluidizado	7
2.3. Estado da Arte: Gaseificação de resíduos em escala industrial no mundo ..	8
2.4. Metodologias disponíveis	11
2.4.1. <i>Escoamento Multifásico Denso Reativo</i>	13
2.4.2. <i>Abordagem Lagrangeana</i>	14
2.4.3. <i>Abordagem Euleriana</i>	15
2.4.4. <i>Modelos de Arrasto</i>	16
2.4.5. <i>Scaling-up</i>	17
2.4.6. <i>Turbulência</i>	18
2.4.7. <i>Transferência de Calor</i>	19
2.4.8. <i>Reações Químicas e Transferência de Massa</i>	20
2.4.9. <i>Acoplamento Termoquímica-Fluidodinâmica</i>	22
2.4.10. <i>Modelagem Computacional</i>	22
2.5. Software OpenFOAM®	24
3. CAPÍTULO III.....	28
PROCEDIMENTOS TEÓRICOS E EXPERIMENTAIS	28
3.1. Planta Piloto de Mauá-SP	29
3.2. Caracterização do Problema	33
3.3. Etapas do desenvolvimento do Modelo CFD.....	36
3.4. Hipóteses simplificadoras.....	39
3.4.1. <i>Geométricas</i>	39
3.4.2. <i>Vias de acoplamento numérico fluidodinâmico</i>	42
3.4.3. <i>Alcatrão</i>	44
3.4.4. <i>Hidrocarbonetos de Cadeia C₆+H_x (heptano e superiores)</i>	45
3.4.5. <i>Demais reações heterogêneas</i>	45

3.4.6.	<i>Evaporação</i>	47
3.4.7.	<i>Demais reações homogêneas</i>	48
3.4.8.	<i>Fenômeno de Shrinkage (ou Shrinking) e a Polidispersão das partículas</i>	50
3.4.9.	<i>Reações de abatimento e compostos complexos</i>	51
3.4.10.	<i>Radiação</i>	52
3.5.	Modelo Matemático	53
3.6.	Fluidização	60
3.6.1.	<i>Estudo de Caso e Modelo Físico de Fluidização</i>	62
3.7.	Modelagem do CDRSU	65
3.8.	Modelagem Termoquímica.....	68
3.8.1.	<i>Equação do Balanço de Espécies</i>	69
3.8.2.	<i>Devolatilização</i>	70
3.8.3.	<i>Reações Heterogêneas e Homogêneas</i>	72
3.8.4.	<i>Gaseificação e Pirólise</i>	74
3.9.	Metodologia de Desenvolvimento e Validação do Modelo.....	75
3.10.	Modelo Físico Geral	77
3.11.	Indicadores de Performance de Gaseificação	81
3.12.	Análise Geral do Reator da Planta Piloto de Mauá-SP	83
4.	CAPÍTULO IV	84
	RESULTADOS E DISCUSSÃO	84
4.1.	Validação do Modelo.....	85
4.1.1.	<i>Validação da metodologia numérico-computacional</i>	85
4.1.2.	<i>Validação Fluidodinâmica</i>	93
4.1.3.	<i>Validação Termoquímica</i>	107
4.2.	Resultados	118
4.2.1.	<i>Convergência e Sensibilidade de malha</i>	120
4.2.2.	<i>Balanços de Massa e de Espécies</i>	123
4.2.3.	<i>Caracterização do Gás de Síntese</i>	128
4.3.	O escoamento de larga escala	129
4.4.	Performance de Gaseificação	149
4.5.	Análise Paramétrica	152
4.5.1.	<i>Inclusão de outras reações químicas</i>	152
4.5.2.	<i>Tamanho médio de partículas de CDRSU</i>	154
4.5.3.	<i>Alteração na temperatura do CDRSU no reator</i>	155
4.5.4.	<i>Variação na quantidade de areia no leito</i>	156
4.5.5.	<i>Sugestões para avaliação paramétrica</i>	158
5.	CAPÍTULO V	159
	CONCLUSÕES	159

SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	162
6. CAPÍTULO VI	164
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	164
APÊNDICE I	177
6.1. Estudo de Caso: Definições e Parâmetros para simulações de Devolatilização	177
APÊNDICE II	180
6.2. Condições de contorno configuradas para o modelo definitivo do presente trabalho implementadas no OpenFOAM	180
APÊNDICE III	181
IMPLEMENTAÇÕES NO SOFTWARE OPENFOAM	181
6.3. Árvore de arquivos de sistema do software	181
6.4. carbogasEulerFoam.C	185
6.1. reactionsRates.H	194
6.2. printInitialMass.H	197
6.3. printInstMass.H	198
6.4. Arquivos de escritura de dados	202
6.4.1. devolatilization.H	202
6.4.2. boudouard.H	202
6.4.3. reforming.H	203
6.4.4. methanation.H	203
6.4.5. waterGasShift.H	204
6.4.6. methaneSteamReforming.H	204
6.5. createfields.H	205
6.6. YEqns.H	214
6.7. heterogeneousChemicalProperties	217
6.8. fvSchemes	220
6.9. blockMeshDict	221
6.10. controlDict	224
6.11. singleGraph	238
6.12. topoSetDict	239
6.13. setfields	240
6.14. decomposeParDict	241
6.15. fvSolutions	241

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

1.1. Motivação

A presente linha de pesquisa do Laboratório de Transferência de Calor e Massa (LTCM) da Universidade Federal de Uberlândia (UFU) surgiu por meio de um Projeto de Pesquisa, Desenvolvimento e Inovação (P&D+I) celebrado entre a UFU, Furnas Centrais Elétricas S.A. e a empresa Carbogás Energia Ltda. Este estudo envolve a patente PI 1001589-2 A2 do reator termoquímico, desenvolvido pela Carbogás Energia Ltda. O projeto conta com uma planta piloto de gaseificação de Combustível Derivado de Resíduos Sólidos Urbanos (CDRSU) localizada na cidade de Mauá-SP, objeto de estudo do presente trabalho, de onde foram obtidos resultados experimentais, operacionais e de projeto.

A usina termoquímica Planta Piloto, utilizada para testes, localizada na cidade de Mauá-SP é capaz de realizar o processamento termoquímico do CDRSU, além de outras biomassas como pneu e madeira, por meio do processo de gaseificação. A biomassa é convertida em gás de síntese, um gás combustível que pode ser queimado para geração de energia térmica e elétrica de forma sustentável. O reator de gaseificação utilizado, que opera em leito fluidizado, é considerado de larga escala ou de escala semi-industrial, uma vez que pode processar 7,1 t/dia de CDRSU para produzir continuamente 16,9 t/dia de gás de síntese.

Dessa forma, a tecnologia de gaseificação em questão se apresenta como potencial solução para melhor gestão de resíduos, além de satisfazer critérios ambientais internacionais relativos à sustentabilidade e ao meio ambiente; além de se enquadrar nas chamadas Tecnologias *Waste-to-Energy* (WTE), que visam a recuperação energética em resíduos, por meio de processos como a pirólise, gaseificação e incineração.

No Brasil, a Lei 12.305/2010, que instituiu a Política Nacional de Resíduos Sólidos (PNRS), proíbe a queima de resíduos sólidos ou rejeitos (Art. 47, inc. III). Dessa forma, de acordo com a legislação brasileira, a incineração não é permitida.

Diante do contexto apresentado, o presente trabalho foi motivado por:

- i. carência de estudos relacionados à gaseificação de resíduos em **larga escala** envolvendo leito fluidizado;
- ii. desenvolvimento de uma **tecnologia brasileira** com potencial de solucionar o problema do lixo urbano e
- iii. contribuir na utilização de software CFD gratuito para simulação de larga escala.

1.2. Objetivos

O objetivo do presente trabalho foi o desenvolvimento de um modelo para simulação fluidodinâmica computacional de um reator de escala semi-industrial em leito fluidizado para gaseificação de Combustível Derivado de Resíduo Sólido Urbano (CDRSU). Seu desenvolvimento foi feito em software gratuito de livre acesso com a finalidade de ser aplicável de forma prática na simulação de reatores de gaseificação de larga escala para obtenção de resultados proveitosos para operação de tais equipamentos em escala comercial/industrial no que tange à recuperação energética de resíduos.

Nesse contexto, objetivou-se desenvolver um modelo prático em CFD (*computational fluid-dynamics*) com as principais reações químicas envolvidas no processo de gaseificação, utilizando-se de modelos de turbulência, arrasto fluidodinâmico, escoamento multifásico reativo, além da implementação por meio de modelos numéricos que permitisse a obtenção de resultados consistentes com a fluidodinâmica e termoquímica de um reator real de gaseificação de biomassa.

1.3. Objetivos Específicos

- Desenvolver um modelo de simulação fluidodinâmica do reator termoquímico de gaseificação capaz de fornecer dados consistentes com os experimentais e com a literatura, de forma a representar os principais fenômenos da fluidização e gaseificação observados nesse tipo de reator.
- Avaliar a aplicação dos modelos relacionados à turbulência de escoamentos, arrasto fluidodinâmico, escoamentos multifásicos, regimes de fluidização de reatores e escoamentos reativos.

- Analisar a aplicação de tais métodos e os resultados obtidos por meio do Software OpenFOAM® e seus pacotes e utilitários.
- Avaliar aspectos da modelagem quanto a:
 - ✓ definição da geometria e hipóteses simplificadoras;
 - ✓ convergência de malha;
 - ✓ parâmetros iniciais e condições de contorno do modelo;
 - ✓ balanço estequiométrico, de massa, de espécies e de energia;
 - ✓ reações da pirólise e da gaseificação envolvidas;
 - ✓ implementação de reações com mudança de fase;
 - ✓ análise do sistema reativo em simultaneidade de reações heterogêneas e homogêneas;
 - ✓ composição do gás de síntese obtido por simulações;
 - ✓ validação do modelo e comparativos com dados experimentais e de literatura;
 - ✓ análise paramétrica referente à injeção de vapor e sua influência no gás de síntese;
 - ✓ avaliação de parâmetros de performance do reator sob aspecto do estado da arte da gaseificação;
 - ✓ apresentar resultados preditivos do modelo para operações com outros atributos.

1.4. Justificativa

O presente trabalho se justifica pela necessidade pungente que há nos estudos da gaseificação, sobretudo em leito fluidizado para aplicação em escala industrial. Sabe-se sobre a atual carência de estudos, artigos e livros acadêmicos relacionando tais temas que, por se tratar de assuntos complexos da dinâmica de fluidos e termoquímica, dificultam a produção de informações e desenvolvimentos tecnológicos na área.

Em se tratando de biomassas oriundas de resíduos sólidos urbanos, como o CDRSU, observa-se escassez de trabalhos a fim de caracterizá-las, uma vez que são altamente heterogêneas por apresentar grande variabilidade de materiais em sua composição.

Ao se associar as diversas áreas do conhecimento, alta complexidade dos temas e carência de informações ao pré-requisito da aplicação real de tais teorias à larga escala, percebe-se a necessidade de pesquisa na gaseificação de CDRSU em larga escala.

Nesse sentido, o modelo pelo presente desenvolvido tem como objetivo prático diminuir a necessidade da experimentação real em reatores de gaseificação de larga escala, oferecendo a possibilidade da experimentação virtual (simulação computacional) para obtenção de resultados úteis no desenvolvimento tecnológico e operacional desses equipamentos, acarretando menores custos quando da experimentação, maior difusão do conhecimento da aplicação teórica.

No **Capítulo II** desta tese de doutorado foram reunidas as informações do tema objetivado compiladas em uma revisão bibliográfica dos assuntos relevantes para o desenvolvimento deste trabalho. No **Capítulo III**, apresenta-se as principais definições teóricas relacionadas, as etapas de desenvolvimento do presente trabalho, modelos e submodelos contidos na metodologia teórica utilizada. O **Capítulo IV** contém a validação do modelo, resultados e principais inferências de tais informações. No **Capítulo V** apresenta-se as conclusões mais relevantes do presente trabalho, além das sugestões para trabalhos futuros à linha de pesquisa. No **Capítulo VI** foram compiladas as referências bibliográficas utilizadas ao longo de todo o texto. Por fim, os **Apêndices** contêm os elementos, desenvolvidos pelo autor, considerados essenciais para conferência de dados e informações, porém, quando suprimidos não prejudicam a compreensão da tese.

CAPÍTULO II

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A gaseificação é um processo termoquímico para a conversão energética de combustíveis que já tem aplicação industrial há muitas décadas, seja na indústria energética do carvão e seus derivados (RAMAKRISHNAN et al., 2023). Nesse processo, o combustível ou a matéria prima útil é processada termicamente para sua degradação térmica em escassez de oxigênio com a finalidade de obter-se gás combustível, denominado gás de síntese como produto para diversas aplicações (MOTTA et al., 2022).

Conforme será pontuado a seguir, existem vários tipos de tecnologias para processamento de diversos materiais que utilizam a gaseificação. Em se tratando de resíduos e biomassas, sua aplicação é confrontada com determinadas particularidades que inviabilizam as técnicas industriais mais comuns. Por exemplo, comparando-se com o carvão, as biomassas vegetais como lenha, *pellets* e restos da indústria florestal implicam maior complexidade, maior heterogeneidade e diversidade de componentes e microcomponentes (NOBRE et al., 2020). Nesse sentido, a aplicação da gaseificação de derivados de resíduos sólidos urbanos consiste no maior grau de complexidade de processamento termoquímico possível (WANG et al., 2023).

As soluções a nível industrial/comercial existentes com a finalidade de gaseificação dessa biomassa altamente heterogênea em sua composição encontram-se frequentemente reprimidas em sua aplicação devido à dificuldade de viabilização dessa tecnologia no âmbito econômico, ambiental e energético (SUN et al., 2023a).

Contudo, a tecnologia da gaseificação em leito fluidizado, discutida e demonstrada no presente trabalho, tem apresentado grandes avanços e alcance viável no meio industrial e

comercial. Seu maior objetivo é a implementação em larga escala de uma solução sustentável para o lixo produzido de residências e sua recuperação energética.

O presente trabalho se insere nessa linha de pesquisa com o intuito de demonstrar a viabilidade energética da tecnologia desenvolvida por meio da modelagem computacional, buscando-se os modelos teóricos e numéricos para desenvolvimento de um modelo CFD capaz de reproduzir resultados de testes experimentais.

No decorrer da Revisão Bibliográfica do presente trabalho e conforme apresentado adiante, não foram encontrados trabalhos envolvendo a simulação CFD de reatores para gaseificação de RSU/CDR em leito fluidizado operados escala semi-industrial ou industrial. Portanto, o presente trabalho visa contribuir com o estudo dessa tecnologia nesse segmento.

2.1. Gaseificação e o Fenômeno da Fluidização

Denomina-se fluidização o efeito obtido em determinados escoamentos entre fase(s) dispersa(s) e fase(s) contínua(s) em que partículas sólidas assumem características típicas de escoamentos de fluidos. Num reator termoquímico, por exemplo de gaseificação, esse fenômeno ocorre devido ao escoamento da fase gasosa (ar de insuflamento e gases produzidos) em contato com partículas sólidas. Essa fluidodinâmica promove a agitação do chamado leito fluidizado, o que impõe trajetórias aleatórias sobre as partículas em um escoamento essencialmente turbulento.

Na década de 1920, foi patenteada a tecnologia de gaseificação de carvão em leito fluidizado e, na década de 1940, foi desenvolvida a primeira unidade de larga escala para processamento industrial de hidrocarbonetos de petróleo pelo craqueamento catalítico em leito fluidizado (PASSOS; BARROZO; MUJUMDAR, 2014).

A fluidização foi estudada com enfoque no presente trabalho uma vez que é um processo complexo que envolve a Turbulência dos Escoamentos, influência na Transferência de Fases, intensificação dos processos de Transferência de Energia Térmica e induz alterações nas taxas de reações químicas. As especificidades desse processo se dão em razão de um escoamento caótico, de diferentes fases e materiais, com processos químicos e térmicos simultâneos e de diferentes possibilidades de parâmetros operacionais.

Atualmente, a fluidização é amplamente utilizada na indústria devido a vantagens como boa capacidade de *scale-up*, operação e controle nos processos, além de outros benefícios que tornam o tema cada vez mais estudado tanto no meio acadêmico como na

indústria (BASU, 2006; KOPPATZ; PFEIFER; HOFBAUER, 2011; PASSOS; BARROZO; MUJUMDAR, 2014).

Além disso, a maior parte dos estudos encontrados envolvem reatores e experimentos de pequena escala e as atribuições desse fenômeno nos escoamentos em equipamentos de larga escala são pouco conhecidas na aplicação industrial, apesar dos gaseificadores de leito fluidizados serem reconhecidamente os mais promissores no âmbito do presente trabalho.

2.2. Gaseificação de larga escala em Leito Fluidizado

Com relação aos aspectos básicos de projeto que dizem respeito ao funcionamento, geometria e dimensionamento dos reatores termoquímicos de gaseificação, os gaseificadores podem ser classificados em Lopes et al. (2018):

- Leito Fixo (ascendente ou descendente);
- Leito Fluidizado (borbulhante, circulante, *Dual*, etc.);
- Escoamento Direcionado (*Entrained Flow*);
- Tambor Rotativo, de Grelha Móvel;
- Gaseificador a Plasma.

Em escala industrial, foram encontradas somente UTGE operando com tecnologias de gaseificação plasma (e.g. usinas das cidades de Mutsu, no Japão, e em Pune, Índia). Contudo, vale ressaltar que a gaseificação plasma demanda altos níveis energéticos, o que limita sua viabilidade econômica e, pode conduzir à baixa ou negativa produção líquida de energia (WATSON et al., 2018).

Dentre as tecnologias de gaseificação, os reatores de leito fluidizado são os mais promissores, por uma série de razões. Em particular, promovem maior mistura entre os reagentes, temperatura uniforme e a sua grande flexibilidade operacional tornam possível a utilização de diferentes tipos de matéria-prima, incluindo resíduos (MATERAZZI et al., 2016).

Os reatores de leito fluidizado têm como vantagens a alta flexibilidade operacional, nos quais pode-se utilizar diferentes agentes fluidizantes, temperaturas de operação, tempo de residência, adição de reagentes ao longo do reator e operação com ou sem catalisadores (ARENA; ZACCARIELLO; MASTELLONE, 2010).

Apesar do reator de leito fluidizado apresentar grandes vantagens sobre outras configurações (MATERAZZI et al., 2016; MOTTA et al., 2019), não são os mais aplicados em processos de gaseificação devido à sua complexidade. Segundo Ramos et al. (RAMOS

et al., 2018), a maior preocupação com relação à conversão energética do RSU/CDR é referente a sua heterogeneidade. Assim, a implementação de uma biomassa heterogênea como o CDR torna sua aplicação em larga escala ainda mais complexa.

Apesar de biomassas, como o carvão e madeira, serem utilizadas na gaseificação há mais de um século, ainda há carência na compreensão das complexas interações fluido dinâmicas e fenômenos térmicos durante a degradação térmica da biomassa em reatores de leito fluidizado (GERBER; BEHRENDT; OEVERMANN, 2010).

O reator termoquímico avaliado no presente trabalho é um gaseificador de leito fluidizado, cujo escoamento pode assumir, a depender das condições de operação, características borbulhante ou circulante. Sua classificação, segundo Arena (ARENA, 2012), é de reator autotérmico, de baixa temperatura (850 °C), operado à pressão ligeiramente acima da pressão atmosférica, de formação de cinzas secas, podendo utilizar o ar e/ou vapor como agente gaseificante, destinado a conversão de CDRSU em gás de síntese para geração de energia térmica e elétrica em ciclo a vapor.

2.3. Estado da Arte: Gaseificação de resíduos em escala industrial no mundo

Makwana et al. (2023) fizeram uma revisão bem atualizada sobre as tecnologias *Waste-to-energy* mundialmente utilizadas. Os autores evidenciaram vantagens e desvantagens de diferentes métodos, apontando ainda a questão da complexidade no processamento em larga escala e ainda em desenvolvimento. Porém, finalizaram com a conclusão de que a tecnologia de gaseificação em leito fluidizado apresenta-se como a melhor solução para RSU.

Erdiwansyah et al. (2023) constataram que a tecnologia de gaseificação frequentemente encontrada na literatura ainda não encontrou espaço no âmbito comercial devido a (i) dificuldade de remoção do alcatrão do syngas e (ii) altos custos envolvidos para aplicação em larga-escala.

Pio e Tarelho (2021) fizeram o levantamento de sistemas de gaseificação maiores que 3 MW_{th} na Europa, constatando numerosas usinas de gaseificação em larga escala. As tecnologias empregadas nas mesmas envolvem leito fixo, fluidizado, reatores pressurizados e de design próprios. Entretanto, as plantas industriais encontradas são em sua maioria para processamento de biomassas homogêneas (madeira e vegetais), não envolvendo CDR (do inglês *RDF*) oriundo de RSU. Consequentemente, o gás de síntese produzido por várias dessas usinas, apresentam poder calorífico (*LHV*, do inglês, *Low Heating Value*) mais elevado que o de CDR/RSU, devido à utilização de biomassa de composição mais

homogênea e de alto poder calorífico. Fato que implica menor eficiência termodinâmica geral do processo, corroborando ainda a dificuldade da aplicação da gaseificação de CDR/RSU em larga escala.

Nesse sentido, buscou-se o Estado da Arte de trabalhos da literatura acadêmica de aplicações dessa tecnologia no mundo, compilados na Tab. 2.1, e dos trabalhos encontrados de aplicações brasileiras sobre o tema, sintetizados na Tab. 2.2. Em resumo, a gaseificação de resíduos sólidos urbanos (e seus derivados) encontra-se pouco difundida no âmbito industrial, não alcançou ainda a primazia como solução sustentável da geração cada vez maior de lixo (MAKWANA et al., 2023) e não são encontrados estudos com essa finalidade. No Brasil, os trabalhos encontrados envolvem plantas experimentais de pequeno porte, com reatores de bancada e também não representa um cenário favorável em termos de viabilidade técnico-econômica.

Tabela 2.1 – Trabalhos recentes da literatura acadêmica relacionados à gaseificação de resíduos

REFERÊNCIA	ESCOPO	TIPO	ESCOAMENTO	MODELO ESPACIAL	TEMP.	ESCALA*	BIOMASSA	PROCESSAMENTO**	SOFTWARE	ABORDAGEM
Presente trabalho	Gaseificação de CDRSU de larga escala	SIMULAÇÃO	Borbulhante	3D	850 °C	10,7 m	CDRSU	297,22 kg/h	N/A	N/A
(NJUGUNA et al., 2023)	Gaseificação de biomassa	EXPERIMENTAL	Borbulhante	N/A	25-825 °C	1,2 m	<i>Macadamia nutshells</i>	30 kg	N/A	N/A
(HAYDARY; RAPČANOVA; ŠKULEC, 2023)	Análise técnico-econômica	SIMULAÇÃO	NI	1D	822 °C	NI	<i>RDF</i>	15.000 kg/h	Aspen Plus	N/A
(TIMSINA et al., 2023)	Gaseificação de biomassa	EXPERIMENTAL	Borbulhante		700-900 °C	<i>Pilot-scale</i>	<i>Wood and grass pellets</i>	25-55 kg/h	N/A	N/A
(RAO; BARMAN, 2023)	Gaseificação de biomassa	SIMULAÇÃO	Borbulhante		873 K	100 cm	<i>Groundnut shell</i>	9,8 kg/h	Fluent	EU-EU
(SINGH et al., 2023)	Gaseificação de biomassa	SIMULAÇÃO	Circulante	2D	554 K	15,5 m	<i>Sawdust</i>	NI	ANSYS	EU-EU
(LIU et al., 2023)	Gaseificação de biomassa	EXPERIMENTAL	NI	N/A	700-900 °C	NI	<i>RDF</i>	0,25 kg/h	N/A	N/A
(YU et al., 2023)	Gaseificação de biomassa	SIMULAÇÃO	<i>DCFB</i>	3D	800 °C	15 m	Genérica	3.240 kg/h	NI	EU-LA
(SUN et al., 2023b)	Gaseificação de biomassa	SIMULAÇÃO	<i>DCFB</i>	3D	1100-1150 K	9,7 m	<i>Wood chips</i>	2.581,2 kg/h	OpenFOAM	EU-LA
(ÁLVAREZ-BERMÚDEZ et al., 2023)	Gaseificação de biomassa	SIMULAÇÃO	Leito Fixo	3D	700 °C	0,25 m	<i>Wood chips</i>	6,8-8,3 kg/h	ANSYS-Fluent	EU-EU
(SUN et al., 2023a)	Gaseificação de biomassa	SIMULAÇÃO	<i>DCFB</i>	3D	1100-1150 K	9,7 m	<i>Wood chips</i>	2.581,2 kg/h	OpenFOAM	EU-LA
(MANU; KAILAS; MADAV, 2023)	Gaseificação de biomassa	EXPERIMENTAL	Borbulhante	N/A	750 °C	0,5 m	Variadas	1-3 kg/h	N/A	N/A
(YANG et al., 2023)	Gaseificação de biomassa	SIMULAÇÃO	Borbulhante	3D	820 °C	1,5 m	<i>Pine wood</i>	14400 kg/h	OpenFOAM	EU-LA
(JIN et al., 2023)	Gaseificação de biomassa	SIMULAÇÃO	Borbulhante	3D	940,15 K	3,2 m	NI	NI	NI	N/A
(VON BERG et al., 2023)	Gaseificação de biomassa	SIMULAÇÃO	<i>DCFB</i>	3D	1207 K	6 m	<i>beech wood cylinders</i>	220 kg/h	ANSYS-Fluent	EU-LA
(LANGNER et al., 2023)	Gaseificação de biomassa	EXPERIMENTAL	Borbulhante	N/A	750 °C	12,5 m	<i>Pelletized SRF, biomassa com ~60% carvão</i>	<80.1 kg/h	N/A	N/A
(WANG; KU, 2023)	Gaseificação a vapor em reator internamente conectado	SIMULAÇÃO	Borbulhante	3D	1023-1173 K	1 m	<i>Almond shell</i>	0,1 kg/h	OpenFOAM	EU-LA
(CHO et al., 2022)	Gaseificação de biomassa	SIMULAÇÃO	<i>DCFB</i>	3D	850 °C	1,2 m	NI	NI	OpenFOAM	EU-LA
(YANG et al., 2022)	Gaseificação de biomassa	SIMULAÇÃO	Borbulhante	3D	750-850 °C	2,5 m	<i>Rice husk</i>	0,36 kg/h	OpenFOAM	EU-LA
(SEZER; ÖZVEREN, 2021)	Análise exergética	SIMULAÇÃO	Borbulhante		700-900 °C	NI	Variadas	0,876 e 34 kg/h	Aspen Plus	Redes Neurais
(PARK et al., 2021)	Gaseificação de biomassa	EXPERIMENTAL	Borbulhante	N/A	700-850 °C	11 m	<i>Rice husk</i>	354-669 kg/h	N/A	N/A
(GUPTA et al., 2021)	Gaseificação de biomassa	SIMULAÇÃO	Borbulhante	3D	750-850 °C	0,5 m	<i>Rice husk</i>	0,35 kg/h	OpenFOAM	EU-LA
(TSEKOS; DEL GROSSO; DE JONG, 2021)	Gaseificação de biomassa	EXPERIMENTAL	Borbulhante	N/A	850 °C	3 m	Wood	4 kg/h	N/A	N/A
(FAN et al., 2021)	Gaseificação de biomassa	SIMULAÇÃO	<i>DCFB</i>	3D	850 °C	1,37 m	NI	10 kg/h	NI	EU-LA
(RITVANEN et al., 2021)	Gaseificação de biomassa	SIMULAÇÃO	<i>DCFB</i>	1D	730-790 °C	20 m	<i>Wood pellets</i>	23.918,4 kg/h	NI	N/A
(NISAMANEENATE et al., 2020)	Investigação dos fenômenos de aglomeração de leito e defluidização	N/A	N/A	N/A	700-900 °C	100 cm	<i>Rice straw</i>	0,24 kg/h	N/A	N/A
(FAN; YANG; JIANG, 2020)	Gaseificação de biomassa	EXPERIMENTAL	Circulante	N/A	750 °C	20 m	<i>Rice husk</i>	NI	N/A	N/A

*A altura do reator foi utilizada para critérios comparativos. Não representando fielmente a escala dos diversos tipos de reatores de gaseificação.

**A unidade apresentada foi normalizada para critérios comparativos.

DCFB – Leito Fluidizado Circulante Dual; *RDF* – Combustível Derivado de Resíduos, *SRF* – Resíduo Sólido Recuperado; EU-EU – Abordagem Euleriana-Euleriana; EU-LA – Abordagem Euleriana-Lagrangeana

NI – Não informado; N/A – Não se aplica

Tabela 2.2 – Relação de trabalhos recentes de aplicação da gaseificação de resíduos no Brasil

Referência	Escopo	Escala do Reator
(CASTILLO SANTIAGO; PÉREZ; SPHAIER, 2023)	Gaseificação em leito fixo de biomassa e óleo vegetais	Escala de Laboratório (Altura 0,4 m)
(MOURA et al., 2023)	Simulação de processo e análise econômica para produção integrada de metanol, ácido acético e éter dimetil por meio da gaseificação de bagaço de cana	
(DÍAZ GONZÁLEZ et al., 2023)	Modelagem no software Aspen Plus para gaseificação em leito fixo (<i>downdraft</i>) de biomassa de lignocelulose	N/A
(LAMAS et al., 2023)	Efeito da torrefação na co-gaseificação a vapor de uma mistura de resíduos florestais e RSU de aterro para produção de H2 e mitigação de emissões de CO2	NI
(DOVICH FILHO et al., 2023)	Análise do panorama brasileiro para seleção de tecnologias com potencial em bioeletricidade	N/A
(RODRIGUES et al., 2022)	Análise técnico-econômica sobre a incineração e gaseificação de RSU no Brasil	N/A
(FERREIRA DE OLIVEIRA LEITE et al., 2022)	Avaliação de alternativas tecnológicas para o tratamento de RSU	N/A
(DE ALMEIDA NEUWALD et al., 2022)	Gaseificação catalítica a vapor de biomassa vegetal (capim elefante)	Escala de Laboratório
(MOTTA et al., 2022)	Simulação de gaseificação de biomassas do Brasil	NI
(PAULINO et al., 2022)	Análise termodinâmica da gaseificação plasma de resíduos biomédicos	N/A
(LA PICIRELLI DE SOUZA et al., 2021)	Revisão sobre a geração elétrica no Brasil oriunda do potencial dos resíduos agroflorestais	N/A
(FERRAZ DE CAMPOS et al., 2021)	Revisão sobre a gestão de RSU no Brasil e Portugal	N/A
(COPA REY et al., 2021)	Avaliação técnica da gaseificação de biomassa da indústria do açúcar	N/A
(MACHIN et al., 2021)	Avaliação econômica e ambiental da gasificação integrada em ciclo combinado de turbina a gás	N/A
(CASTILLO SANTIAGO et al., 2021)	Análise da gaseificação de resíduo de óleo para geração de eletricidade	Simulação 0D com o software AspenPlus
(AMARO et al., 2021)	Simulação de gaseificação em leito fixo	NI
(REAL GUIMARÃES et al., 2021)	Gaseificação de lignocelulose e síntese <i>Fischer-Tropsch</i> para produção de biocombustíveis líquidos	Processo próprio
(DO NASCIMENTO et al., 2021)	Desintoxicação de bagaço de sisal hidrolisado utilizando carvão ativado produzido a partir da gaseificação de resíduos de aço	NI
(LAZZAROTTO et al., 2020)	Avaliação experimental da função do CaO na gaseificação a vapor de plásticos oriundos de RSU	Escala de Laboratório
(VERISSIMO; LEIROZ; CRUZ, 2020)	Simulação da gaseificação de bagaço de cana em leito fluidizado borbulhante	Escala de Laboratório (Altura 1,8 m)
(SMITH LEWIN; FONSECA DE AGUIAR MARTINS; PRADELLE, 2020)	Simulação do processo de gaseificação em leito fixo (<i>downdraft</i>) para aplicação da co-gaseificação de RSU e bagaço de cana	Escala de Laboratório (Altura 50 cm)
(PAULINO; ESSIPTCHOUK; SILVEIRA, 2020)	Avaliação do uso do gás de síntese oriundo da gaseificação plasma para resíduos biomédicos	N/A

2.4. Metodologias disponíveis

Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD), Redes Neurais Artificiais (RNA), Modelos Cinéticos e Modelos de Equilíbrio Termodinâmico são as estratégias mais comumente empregadas para modelar um gaseificador. A modelagem CFD, que se baseia principalmente em equações de conversão de massa, calor e momento, é uma metodologia que fornece insights sobre o fluxo de fluidos, transferência de calor e fluxo de energia, reações químicas e conversão de massa e momento (AJORLOO et al., 2022). A RNA, que é classificada como um método de modelagem não mecanicista, sem equilíbrio e não analítico, depende de extensos dados de entrada experimentais para prever o processo com a ajuda da regressão, requer menos conhecimento em comparação com suas contrapartes e pode aumentar a precisão da previsão da composição. Quanto ao Modelo Cinético, exige um alto nível de sofisticação e esforços computacionais intensivos, pode prever de forma abrangente e precisa a composição do produto, o perfil de temperatura e o rendimento de conversão ao longo do comprimento do reator. Enquanto os Modelos de Equilíbrio Termodinâmico abordam a Energia Livre de Gibbs e a entropia.

A Tab. 2.3 apresenta o resumo dessas metodologias e suas principais características em relação à modelagem do sistema fluidodinâmico do presente trabalho:

Tabela 2.3 – Resumo das principais características das metodologias aplicadas. Adaptado de (AJORLOO et al., 2022)

CFD	RNA	Modelos Cinéticos	Modelos de Equilíbrio Termodinâmico
Baseado em equações de balanço massa, calor e momento	Uma abordagem de modelagem matemática	Inclui cinética de reação, hidrodinâmica	Simples e fácil de implementar e independente do projeto do gaseificador
Previsão altamente precisa sobre a composição do gás de síntese	Faz uso de regressão para correlacionar fluxos de entrada e saída	do sistema, distribuição de tamanho de partícula	Aproximação convincente da composição do gás de síntese e previsão dos rendimentos máximos alcançáveis
Fornecer perfis de temperatura e demais propriedades físico-químicas	Mostra boa precisão na previsão de composição	prevê a composição do gás e os perfis de temperatura ao longo do comprimento do reator	Uma ferramenta prática para análise de sensibilidade
Bom para projetar reatores e solucionar problemas	Exige menos conhecimento dos fenômenos do sistema	Resultados precisos mesmo em baixas temperaturas	Não há necessidade de reações químicas e mecanismos de conversão
Difícil de implementar devido à complexidade do processo de gaseificação	Exige muitos dados experimentais	Computacionalmente intensivo	O estado de equilíbrio não pode ser alcançado, especialmente sob baixas temperaturas operacionais
Computacionalmente oneroso	Não fornece resultados analíticos	sensível ao processo de contato gás-sólido	Baixa precisão de espécies de gases Muitas suposições simplificadoras

Os diferentes métodos são aplicados a depender do nível de detalhes ou qualidade das informações esperadas. Softwares como *AspenPlus* trabalham com modelos cinéticos e são amplamente utilizados na experimentação virtual (DÍAZ GONZÁLEZ et al., 2023; RANJAN et al., 2023; ZHANG et al., 2024; ZHAO et al., 2023), contudo, para a finalidade do desenvolvimento deste trabalho, buscou-se maior nível de detalhamento de informações para

melhor aprofundamento na técnica e operação de reatores de larga escala; o que impõe a necessidade da utilização da simulação CFD.

As simulações com CFD são uma importante ferramenta do desenvolvimento tecnológico e otimização de sistemas industriais. Nesse sentido, um modelo numérico abrangente bem consolidado pode servir como uma ferramenta confiável para obter informações detalhadas sobre características físicas e fluidodinâmicas complexas observadas nos reatores de gaseificação (GUPTA et al., 2021). Ainda, sem a necessidade de experimentação física, envolvendo maiores custos e recurso técnico. Ademais, um modelo virtual de um reator de gaseificação de RSU ou derivados é especialmente importante devido ao grau de periculosidade e contaminação inerente a manipulação dessa biomassa em sua experimentação.

Por essa razão, as metodologias de simulação foram examinadas com o intuito de reunir as mais utilizadas em simulações do tipo de equipamento em questão para o desenvolvimento deste trabalho.

2.4.1. Escoamento Multifásico Denso Reativo

O sistema de escoamento de um reator de gaseificação de biomassa em leito fluidizado borbulhante (*Bubbling Fluidized Bed* - BFB), como o do Reator da Planta Piloto de Mauá-SP em questão, é categorizado como um escoamento fluidodinâmico multifásico, denso em partículas (de biomassa e de areia), submetido a temperaturas relativamente elevadas de modo a viabilizar taxas de reações em intensidade significativa de forma contínua a fim de se produzir gás de síntese com composição de interesse energético.

Os gaseificadores BFB são categorizados como sistemas de suspensão densa, onde um leito de materiais inertes ou catalíticos é mantido a uma temperatura uniforme e, assim, eliminando pontos quentes localizados. Para um projeto adequado, otimização e aumento de escala de reatores em leito fluidizado, torna-se indispensável compreender os parâmetros que influenciam o processo de gaseificação. Em experimentos, modelos reduzidos são construídos para conduzir uma análise de sensibilidade de parâmetros relevantes do processo de fluidodinâmica e termoquímica. No entanto, tais experimentos podem ser bastante caros e demorados. Além disso, torna-se extremamente difícil investigar os efeitos das condições operacionais nas variações temporais e espaciais de parâmetros importantes, como mistura gás-sólidos, concentração de espécies, temperatura etc., durante a operação da planta (GUPTA et al., 2021). Por essa razão, o presente trabalho tem o objetivo de representar essa tecnologia por meio da experimentação virtual (simulação) computacional.

Dentre os principais modelos para simulação de reatores de leito fluidizado envolvendo diferentes níveis de precisão e detalhamento da modelagem, os mais atualmente estudados são as abordagens lagrangeana e euleriana, com suas principais distinções apresentadas na Tab. 2.4. Tais abordagens conferem o mais elevado nível de detalhamento dos fenômenos físicos, químicos, térmicos e fluidodinâmicos (GERBER; BEHRENDT; OEVERMANN, 2010). Ademais, do ponto de vista de engenharia, são os que conferem a consistência satisfatória para análises de processos industriais e desenvolvimento científico.

Tabela 2.4 - Diferenças entre as principais abordagens (KONG et al., 2020; ZHONG et al., 2016)

EULER-EULER	EULER-LAGRANGE
Amplamente utilizada no estudo de características fluidodinâmicas e reativas	Fornecem informações detalhadas da fase sólida como trajetória de partículas e interações com partículas
Maioria dos modelos limitados à escala laboratorial. Trabalhos de escala industrial não encontrados	Necessidade de submodelos (evaporação, quebra/aglomeração, transferência de massa, etc.)
Computação mais eficiente	Custo computacional originalmente alto em escoamentos densos e, também, devido às reações químicas
Baixo custo computacional, porém aumentado com as reações químicas	Método DEM (apresentado a seguir) não é muito adequado para simulação de reatores de larga escala
Dificuldades na modelagem de partículas de diferentes tipos e tamanhos	Formulações envolvendo ‘pacotes computacionais’ (do inglês, <i>parcels</i>) são bastante promissoras (MP-PIC)
Limitações relacionadas à conversão da partícula sólida em gás	

2.4.2. Abordagem Lagrangeana

Na abordagem lagrangeana (Euler-Lagrange), a trajetória de partículas dispersas, sejam sólidas, bolhas ou gotas, são calculadas individualmente por meio da cinemática física da partícula e o comportamento da fase contínua regido pelas equações de balanço de quantidade de movimento (*Navier-Stokes*). Tais equações são acopladas via implementação de termos de forças de interação entre fases. A aplicação dessa abordagem pode fornecer

informações específicas de determinadas partículas em movimento. Entretanto, em escoamentos densos – que contém grande quantidade de fase dispersa –, o cálculo da dinâmica de cada elemento disperso é um dos fatores mais desfavoráveis que afetam o custo computacional demandado para a simulação.

Nesse sentido, diversas metodologias sob abordagem lagrangeana foram propostas e têm sido amplamente utilizadas para finalidades semelhantes à do presente trabalho. A seguir, são pontuadas as mais utilizadas:

- ***Discrete Element/Particle Method (DEM/DPM)***: Modela um número finito de partículas discretas interagindo por meio de forças de contato e sem contato, e cada partícula se move transladadamente e rotacionalmente em um sistema considerado descrito pelas equações de movimento de Newton (ZHONG et al., 2016).
- ***Multi-phase Particle-in-cell (MP-PIC)***: um “pacote” representa um certo número de partículas movendo-se na mesma velocidade. As interações entre partículas são resolvidas através da tensão sólida. No método MP-PIC o custo de solução é reduzido uma vez que as colisões não são resolvidas diretamente como no DEM e também devido à implementação do conceito de pacote. Foi desenvolvido com o intuito de evitar o rastreamento de um grande número de partículas no modelo de elementos discretos e simplificar o cálculo das interações entre as partículas (KADYROV; LI; ULLAH, 2024).
- ***Distribution Kernel Method (DKM)***: Yang et al. (2022) sugeriram a metodologia para simplificar a modelagem de partículas sólidas no modelo, selecionando “pacotes” referência para a implementação de conjuntos maiores de partículas.

2.4.3. Abordagem Euleriana

Na abordagem Euleriana-Euleriana, tanto as fases gasosas quanto as sólidas são tratadas matematicamente como meio interpenetrantes. A ideia básica é usar as equações pertinentes ao modelo que correlacionam as mudanças no fluxo de gás-partículas em cada unidade de computação para descrever as propriedades do gás e da fase sólida. Não é necessário monitorar as trajetórias de cada partícula sólida. Portanto, a abordagem Euleriana-Euleriana é uma abordagem de modelagem acessível que poderia realizar simulação de escoamentos densos reativos em escala piloto ou industrial (ZHONG et al., 2016).

- ***Volume of Fluid (VOF)***: Trata-se de um modelo dito a um fluido. As mesmas equações são válidas para todas as fases envolvidas – o campo de velocidade e pressão é o

mesmo para todas as fases. Propriedades na interface (densidade, viscosidade etc.) são ponderações das propriedades de cada fase. O método VOF requer apenas uma informação sobre cada célula da malha, sobre a existência, inexistência ou fração de existência do fluido.

- Modelos Euleriano-Euleriano: Consiste nos modelos VOF aplicados em mais de uma fase, portanto denominados multifluidos ou multifásicos. As equações de transporte são calculadas para cada fase do sistema. Em se tratando de duas fases, tem-se o denominado *Two Fluid Model* (TFM) (GIDASPOW, 1994a).
- *Kinetic Theory of Granular Flow* (KTGF): Modelo de fechamento do sistema de equações aplicado para a fase sólida, representando o movimento das partículas e simulando suas colisões.

2.4.4. Modelos de Arrasto

- Wen-Yu (1966): Baseado na equação de arrasto de Schiller-Naumann, incorpora correções para leitos fluidizados. Considera fatores de correção para a distribuição de tamanho das partículas e a concentração volumétrica do leito. É uma abordagem empírica que se ajusta aos dados experimentais.
- Syamlal-O'Brien (MUSSE et al., 2015): Propõe uma equação de arrasto baseada em dados experimentais de escoamentos bifásicos (gás-partícula). Considera a interação entre partículas e leito fluidizado, levando em conta a presença de bolhas de gás no leito. É uma extensão do modelo de Schiller-Naumann, mas incorpora correções específicas para escoamentos em leitos fluidizados.
- Gidaspow (1994a): Um dos modelos mais clássicos para a simulação de escoamento denso. Desenvolvido por Gidaspow, é uma abordagem que considera a interação entre as partículas em termos de troca de momento e energia. Incorpora termos adicionais para representar a influência do leito fluidizado no comportamento das partículas. Utiliza uma abordagem mais detalhada em termos de interação entre partículas, sendo considerado mais complexo e mais preciso em algumas situações.
- *Energy Minimization Multi-Scale* (EMMS) (YANG et al., 2003): É uma abordagem amplamente utilizada em modelagem de escoamento de partículas em sistemas multifásicos, como leitos fluidizados. Essa metodologia visa otimizar a distribuição de energia no sistema, minimizando a energia dissipada pelas partículas em escala local e global. Modelo que chama atenção devido a sua capacidade de prever aglomeração de partículas.

2.4.5. *Scaling-up*

Uma das técnicas bastante utilizada na modelagem e no desenvolvimento de modelos físicos é o *Scaling-up* ou *Scale-up*, que se baseia no princípio da Análise por Semelhança ou da Similaridade. O método consiste na comparação de um ‘protótipo’ e um ‘modelo’ com características semelhantes. Por exemplo (JAKOBSEN, 2008):

- **Similaridade geométrica** significa que todas as dimensões pertinentes são semelhantes e têm uma razão constante comum;
- A **similaridade cinemática** requer que todas as velocidades nas duas escalas diferentes tenham uma razão constante comum;
- A **similaridade dinâmica** exige que todas as relações de força pertinentes tenham uma razão constante comum.

Na mecânica dos fluidos, a **similaridade fluidodinâmica** comumente adotada se baseia no número adimensional de Reynolds. Nesse sentido, o escoamento é considerado semelhante no caso do número de Reynolds do ‘protótipo’ (Re_p), de menor escala, ser igual ao número de Reynolds do ‘modelo’ (Re_m). Essa análise se torna interessante na condução de experimentos fluidodinâmicos de pequena escala representativos de modelos de maiores escalas.

De acordo com Yang (2003), “*quando todas as relações de força (Tab. 4.1) são iguais para um modelo em escala reduzida e em uma escala aumentada ou comercial (presente trabalho), então o comportamento fluidodinâmico do modelo em escala deve ser idêntico ao de tamanho aumentado*”. Este tipo de estudo de aumento de escala é outra ferramenta útil para o desenvolvimento e análise de modelos de fluidização, sem experimentação física completa.

Trata-se, pois, de uma técnica que foi explorada no presente trabalho para estudo do Fenômeno da Fluidização, por ser útil no desenvolvimento de tecnologias, contribuindo para a redução de custos de instalações e de operação. No caso da gaseificação de CDRSU, o *scale-up* é um estudo de grande importância, uma vez que experimentos realizados em plantas como a Planta Piloto de Mauá-SP são de alto custo agregado e de elevado risco ambiental.

2.4.6. Turbulência

- Simulação Numérica Direta (do inglês, DNS): As equações constitutivas do escoamento turbulento são solucionadas por meio dos métodos numéricos, o que não é uma boa escolha na maioria dos escoamentos densos devido à exigência de recursos computacionais dispendiosos.
- *Reynolds-Averaged Navier-Stokes* (RANS): As equações Navier-Stokes, que descrevem o comportamento do fluido, são filtradas para separar as componentes médias e as flutuações turbulentas. Isso resulta em um conjunto de equações médias, conhecidas como equações RANS. A Fig. 2.1 apresenta uma esquematização de um exemplo da avaliação da propriedade de temperatura ao longo do tempo.
- *Large Eddy Simulation* (LES): Resolve diretamente as grandes escalas de turbulência, enquanto as pequenas escalas são modeladas. Apresenta um cálculo mais preciso para a velocidade e pressão do gás em cada célula, resultando em mais precisão da força de arrasto. Além disso, o LES tem sido cada vez mais empregado para modelar os fluxos densos de gás-sólido em leitos fluidizados, e muitos resultados razoáveis foram obtidos (FAN; YANG; JIANG, 2020). A Tab. 2.5 foi elaborada para resumo das principais características dos métodos mais utilizados brevemente descritos.
- Modelo $k - \varepsilon$: Trata-se de um modelo de fechamento baseado em RANS em que a turbulência é modelada por meio de duas equações de transporte para duas variáveis chamadas k (cinética turbulenta) e ε (taxa de dissipação de energia turbulenta).

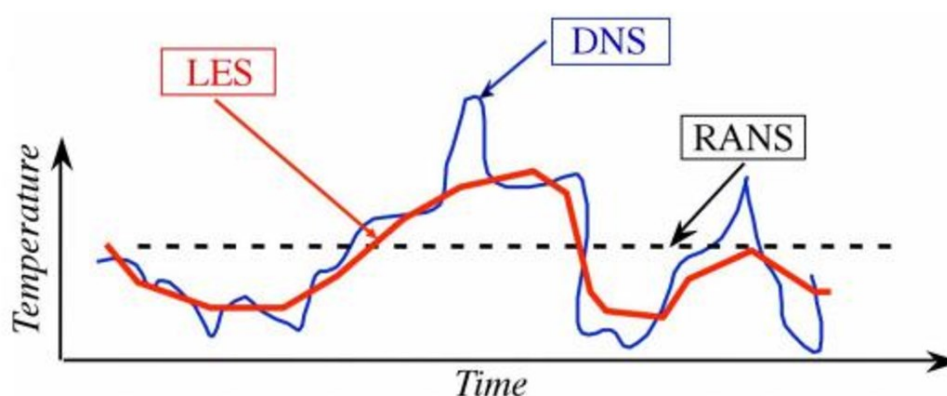


Figura 2.1 – Exemplo de representação esquemática de filtros aplicados ao sinal de temperatura ao longo do tempo. Adaptado de Winklinger; Novella; Valencia (2014)

Tabela 2.5 – Principais características das técnicas de modelagem (ZHONG et al., 2016)

DNS <i>(Direct Numerical Simulation)</i>	RANS <i>(Reynolds Averaged Navier-Stokes)</i>	LES <i>(Large Eddy Simulation)</i>
Simulação de todo o espectro de estruturas turbilhonares	Comportamento médio dos escoamentos turbulentos	Deve-se fazer o uso dos modelos sub-malha (interação de bandas)
Requer métodos numéricos de alta taxa de convergência	Calcula-se pouco e modela-se muito	Requer métodos de discretização espacial e temporal de pelo menos segunda ordem de taxa de convergência
Requer malhas muito refinadas e passos de tempo pequenos	Requer métodos numéricos robusto	
Não necessita de modelo de fechamento		
Quanto maior o Reynolds, maior será o refinamento necessário	Vantagem de se trabalhar com malhas grosseiras	Permite capturar parte do espectro mesmo para altos valores do número de Reynolds

2.4.7. Transferência de Calor

A transferência de energia térmica assume papel de grande relevância no escoamento dos gaseificadores de leito fluidizado. O escoamento multifásico denso em partículas com movimentação caótica intensifica os processos de convecção e gradiente térmico entre as fases. Ainda, a conversão térmica da biomassa em gases provoca a expansão volumétrica, aumentando a dissipação de energia térmica e os efeitos convectivos.

Aliado a isso, sobretudo nos sistemas borbulhantes e circulantes, o agente gaseificante é insuflado em velocidades relativamente elevadas, causando a dispersão e fluidização do material particulado.

Por sua vez, as trocas térmicas induzem alterações na fluidodinâmica e energia interna do escoamento. Mais adiante será discutida as abordagens utilizadas para modelagem do acoplamento, ou não, desses efeitos reversos.

Segundo a taxonomia de Arena (2012), o reator do presente trabalho é classificado como um reator de baixa temperatura, devido a sua temperatura operativa de 850 °C. Reatores que operam a temperaturas superiores à 1200 °C são classificados como reatores de alta temperatura. Nos trabalhos da literatura, a faixa de temperatura entre 700-1000 °C é comumente utilizada no processo de gaseificação em leito fluidizado por promover as reações de redução e proporcionar bom equilíbrio nas taxas de reações oxidativas e redutivas, de modo a produzir gás de síntese com a composição de interesse e valor comercial. A temperatura de 850 °C é buscada na operação do Reator da Planta Piloto de Mauá-SP nesse intuito, o que é uma temperatura considerável em termos de energia térmica para o processo de transferência térmica por meio da radiação, que também deve ser examinada na implementação do modelo computacional.

2.4.8. Reações Químicas e Transferência de Massa

O processo termoquímico em questão será discutido em maiores detalhes no Capítulo III. CAPÍTULO III, uma vez que existem diversas formas de se modelar as interações reativas desse tipo de sistema. Em resumo, o processo no interior do gaseificador se dá em quatro etapas principais:

- (i) **Secagem/Evaporação** da umidade existente e componentes mais voláteis presentes, como álcoois e hidrocarbonetos leves no estado sólido ou líquido na biomassa;
- (ii) **Degradação térmica** (ou **crackeamento térmico**) abrangendo reações de liberação de gases e isolamento do carbono (fixo) da biomassa, descrevendo os processos de produção de alcatrão, líquidos e hidrocarbonetos de cadeia longa, pirólise, produção e degradação de óleos e devolatilização;
- (iii) **Reações Heterogêneas**, que consistem naquelas de mudança da fase sólida, essencialmente o carbono (fixo), para a formação das espécies gasosas por meio principalmente dos processos oxidativos exotérmicos;
- (iv) **Reações Homogêneas**, desenvolvendo as interações de redução e oxidação entre espécies gasosas de forma endotérmica e exotérmica, a depender da composição química presente de determinada microrregião do domínio.

Contudo, diversos autores propõem variados métodos para abordar todo o processo da gaseificação, uma vez que essas etapas e reações ocorrem de maneira simultânea em um reator de leito fluidizado. Por essa razão, alguns métodos são mais aprofundados no ponto

de vista de determinadas substâncias de interesse, como a degradação parcial do alcatrão e subprodutos intermediários antes de sua quebra completa em carbono e gases.

Outros estudos apresentam também a biomassa de forma decomposta, apresentando a fração dos polímeros complexos oriundos da biomassa vegetal, como celulose, lignina e hemicelulose (WIDJAYA et al., 2018); com foco nos modelos relacionados a degradação térmica desses componentes (Fig. 2.2).

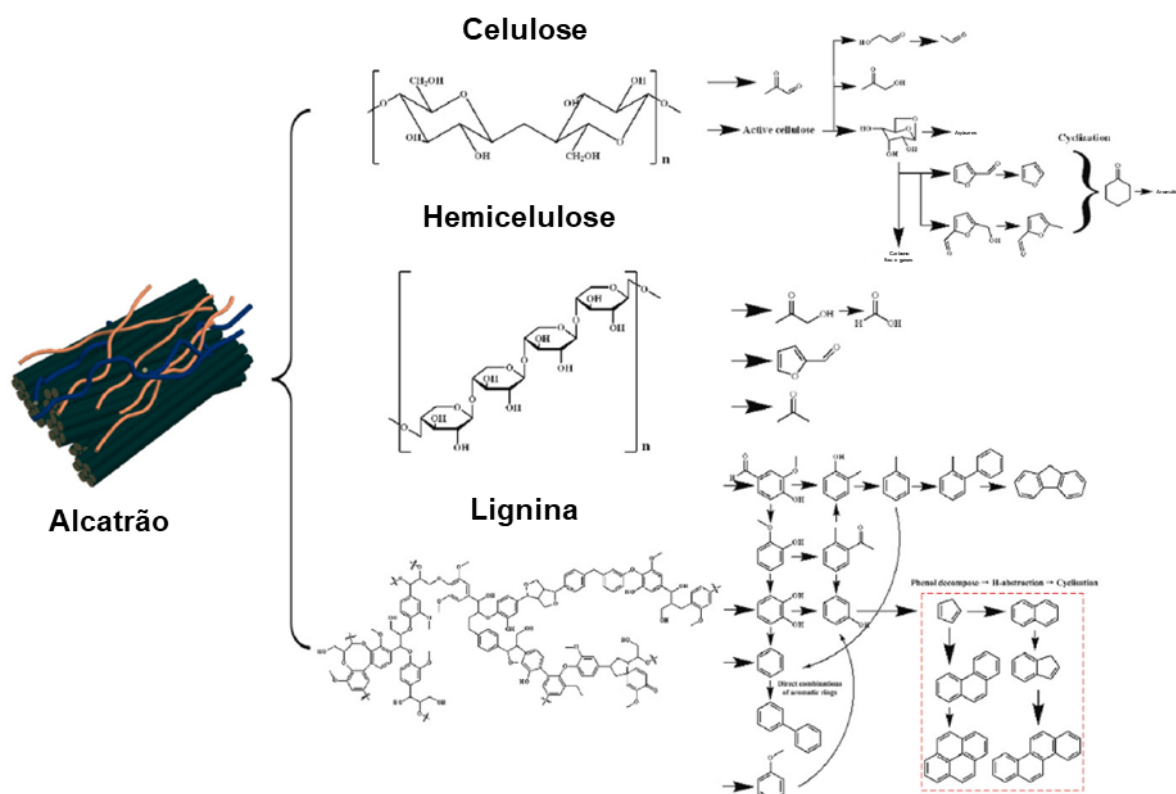


Figura 2.2 - Caminhos de formação de alcatrão derivados dos três principais componentes da biomassa. Adaptado de Yan et al. (2024)

Salienta-se ainda que, nas reações heterogêneas existem outros fenômenos que podem ser modelados por sua influência nas taxas das reações, como a aglutinação de partículas, o rareamento da partícula (aumento da porosidade e diminuição da massa) e o *shrinkage*, que consiste na diminuição gradativa do volume da partícula, diminuindo a área superficial reativa (Fig. 2.3).

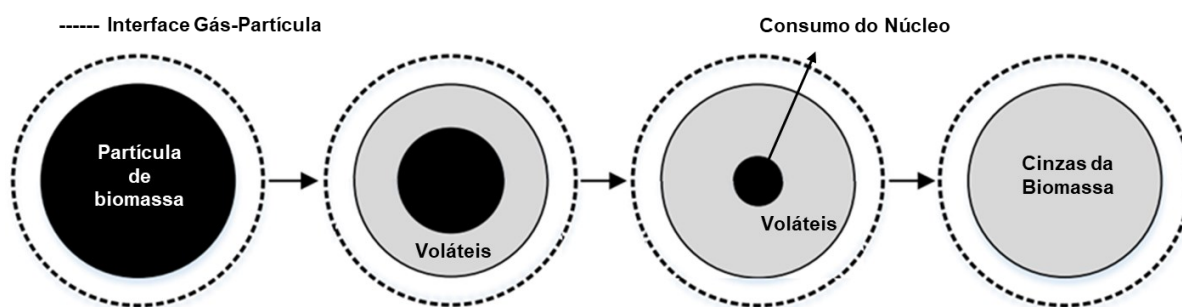


Figura 2.3 – Representação do fenômeno de *shrinkage* numa partícula de biomassa. Adaptado de Steven; Restiawaty; Bindar (2022)

2.4.9. Acoplamento Termoquímica-Fluidodinâmica

O acoplamento de reações químicas e fluxo de gás-partículas é de grande importância na modelagem de escoamento denso reativo. Esta etapa é implementada rastreando a troca de massa, momento e energia. Porém, os métodos de acoplamento de reações homogêneas e heterogêneas são diferentes.

Na química homogênea, a massa é transferida entre espécies de gases, que é representada como termos de fontes químicas na equação de transporte de espécies de gases individuais. As propriedades totais da fase gasosa são calculadas a partir das frações mássicas das espécies que compõem a mistura gasosa. Desta forma, as contribuições da química estão incluídas de forma que a reação gás-gás não altera a massa e a entalpia da mistura.

No entanto, quanto às reações heterogêneas, a massa, a quantidade de movimento e a energia da mistura gasosa variam. As equações da fase gasosa incluem termos fonte devido à troca conservadora de massa, *momentum* e energia entre as fases gasosa e particulada. Ao fornecer esses termos de troca interfase, é realizado o acoplamento de reações heterogêneas com o fluxo gás-partículas. Para reações gás-sólido, a química pode ser descrita e resolvida em escala de partícula ou em uma célula Euleriana. As abordagens Euleriana-Euleriana e Euleriana-Lagrangeana possuem maneiras próprias para a implementação desse acoplamento de efeitos (ZHONG et al., 2016).

2.4.10. Modelagem Computacional

A modelagem de escoamento denso compreende uma grande multidisciplinaridade das teorias e modelos da ciência térmica. Devido à complexidade do objeto tratado, muitos

modelos têm sido propostos para representar os efeitos e fenômenos físicos e químicos quando desses tipos de sistemas. Tais modelos se fazem necessário devido ao alto custo computacional em representar a atividade de inúmeras partículas e interações. Nesse sentido, é de suma importância a identificação das características, respostas e resultados desejados para o desenvolvimento de um modelo computacional que possa produzir informações úteis da experimentação virtual (simulação).

Assim, prossegue-se com a categorização do problema a fim de se selecionar a metodologia e os modelos a serem implementados para atingir tais objetivos. Segundo Widuch et al. (2019), as técnicas computacionais disponíveis capazes de trabalhar com as diversas complexidades existentes na simulação de reatores de gaseificação, podem ser divididas em quatro principais grupos de modelos de:

- **microescala:** Método dos Elementos Discretos (*Discrete Element Method* - DEM), simulação numérica discreta, etc.
- **empíricos e semiempíricos** de macroescala
- **multifluidos** Euler-Euler de meso- e macroescala
- **híbridos** Euler-Lagrange (HEL) de macroescala, também conhecidos como métodos *Multiphase Particle-In-Cell* (MP-PIC) e *Distribution Kernel Method* (DKM).

Essa categorização consiste principalmente em definir qual a perspectiva observada para implementar as interações computacionalmente. Por exemplo, a Fig. 2.4 representa diferentes maneiras de se observar o sistema para implementação computacional:

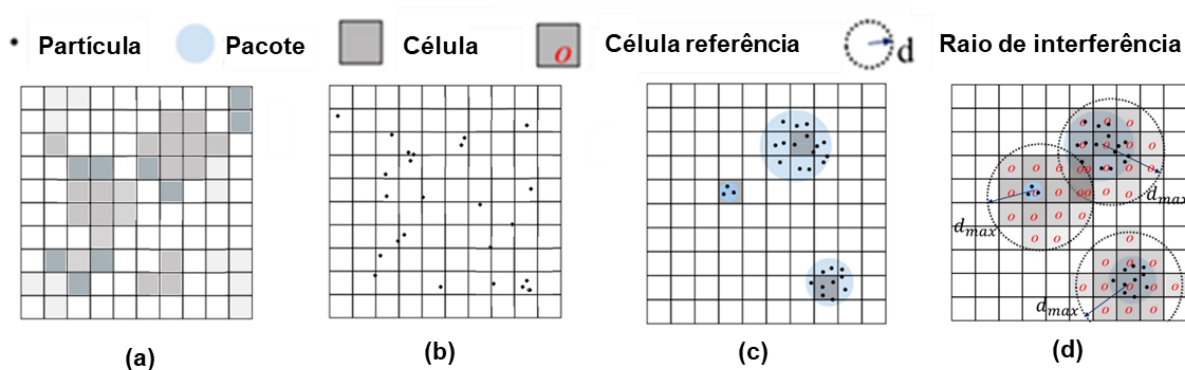


Figura 2.4 – Estratégias utilizadas na modelagem: (a) euleriana, (b) lagrangeana, (c) *Multi-phase Particle-in-cell* e (d) *Distribution Kernel Method*. Adaptado de Yang et al (2022)

Mesmo as metodologias mais recentes e inovadoras, como o DKM, foram utilizadas em uma escala laboratorial. Ou seja, mesmo para casos com geometrias de pequena escala,

ainda assim há necessidade de modelos e métodos simplificadores. Tais observações indicam a grande necessidade de desenvolvimento dessas metodologias computacionais para aplicações de larga escala.

2.5. Software OpenFOAM®

Atualmente, diversos softwares são empregados para simulações de Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD). Em resumo, os mais utilizados são apresentados a seguir com suas principais características:

ANSYS Fluent

- **Vantagens:** Amplamente utilizado e estabelecido na indústria; interface amigável; suporte a uma variedade de modelos de turbulência e física.
- **Desvantagens:** Pode ser oneroso para pequenas empresas; curva de aprendizado íngreme para iniciantes.

OpenFOAM

- **Vantagens:** Código aberto; flexibilidade e adaptabilidade; ampla comunidade de usuários; gratuito.
- **Desvantagens:** Menos amigável para usuários iniciantes; pode exigir conhecimentos avançados de programação.

COMSOL Multiphysics

- **Vantagens:** Capacidade de acoplar diferentes fenômenos físicos; interface gráfica intuitiva; suporte a modelagem multifísica.
- **Desvantagens:** Custo significativo; desempenho computacional pode ser um desafio para simulações complexas.

CFX (ANSYS)

- **Vantagens:** Especializado em simulações de fluido termal e dinâmica dos fluidos; integração eficaz com outros produtos ANSYS.
- **Desvantagens:** Pode ser caro; requer uma curva de aprendizado, especialmente para iniciantes em CFD.

SolidWorks Flow Simulation

- **Vantagens:** Integração direta com o ambiente CAD do SolidWorks; interface fácil de usar; adequado para aplicações de engenharia mecânica.
- **Desvantagens:** Menos recursos avançados em comparação com alguns concorrentes; limitado em termos de simulações complexas.

STAR-CCM+

- **Vantagens:** Capaz de lidar com geometrias complexas; robusto para simulações multifásicas e multidisciplinares.
- **Desvantagens:** Custo elevado; curva de aprendizado desafiadora para usuários iniciantes.

MFIX (Multiphase Flow with Interphase eXchanges)

- **Vantagem:** Especialização em simulações de escoamentos multifásicos, proporcionando uma compreensão aprofundada das interações entre diferentes fases (sólidos, líquidos e gases).
- **Desvantagem:** Curva de aprendizado acentuada, especialmente para usuários menos familiarizados com simulações multifásicas e uma interface gráfica que pode ser menos intuitiva em comparação com softwares comerciais mais estabelecidos.

Dentre os softwares apresentados, o OpenFOAM® foi escolhido principalmente por ser de licença gratuita ilimitada. O software *Open Source Field Operation And Manipulation* (OpenFOAM®) é um programa em linguagem C++ para o desenvolvimento de ferramentas de análise numérica com pré- e pós-processamento para solução de problemas da mecânica do contínuo, incluindo dinâmica dos fluidos computacional. Ademais, incorpora diversos pacotes que podem ser utilizados para simulação de problemas envolvendo escoamentos multifásicos e reativos, objeto de estudo do presente trabalho.

Sua instalação possui excelente interação com o sistema operacional Ubuntu, também de código aberto, construído a partir do núcleo Linux, que é uma plataforma leve que favorece o âmbito de simulação computacional com alta performance de processamento; algo que deveria ser priorizado para simulação do equipamento de escala semi-industrial e disponibilidade de recurso computacional limitada.

Por ser um programa dito de “código aberto”, o usuário tem a possibilidade de alterar qualquer informação, método de cálculo, *solver* utilizado, implementação de novas técnicas

computacionais e teóricas, etc. Dessa forma, a capacidade de simulação e solução de diversos problemas além do desenvolvimento do conhecimento em CFD progride mais rapidamente, devido à acessibilidade e sua grande disseminação, comparativamente aos softwares privativos que requerem uso de licenças comerciais e sua modificação e redistribuição é proibida.

Tabela 2.6 - Principais vantagens e desvantagens do software OpenFOAM

VANTAGENS	DESVANTAGENS
Não há custos de licença	Utilização pouco intuitiva
Desenvolvimento mais rápido dos códigos pela comunidade	Ausência de um sistema integrado de interface gráfica do usuário
Paralelização automática de aplicativos e grande capacidade de paralelização. Permite a utilização dos <i>clusters</i> sem custo adicional com licenças comerciais	Guia do Programador não fornece detalhes suficientes, tornando lento o aprendizado para programação de novas aplicações ou adição de funcionalidades
Ampla gama de aplicações, modelos e <i>solvers</i> prontos para usar	O software não possui um editor CAD para construção de geometrias e geração de malhas de forma intuitiva
Discretização de equações diferenciais parciais usando uma sintaxe legível	Alguns comandos sofrem alterações significativas em atualizações do software
Código aberto e acessível, diferentemente dos softwares comerciais	Originalmente desenvolvido para plataformas GNU/Linux
Participação dos desenvolvedores em fóruns especializados em CFD	Necessário compreender os procedimentos adjacentes e sub-rotinas dos pacotes utilizados

Levando em consideração os aspectos mencionados e considerando que o Laboratório de Transferência de Calor e Massa (LTCM), do qual o autor do presente trabalho faz parte, não se dispunha de outras ferramentas não livres no início do trabalho, o software OpenFOAM® foi escolhido para o presente estudo devido a sua grande capacidade computacional já consagrada no meio acadêmico.

Após a recente aquisição de licenças do Software *ANSYS Fluent* pelo LTCM algumas simulações preliminares foram conduzidas para reprodução do modelo desenvolvido no OpenFOAM. Aquele software apresenta diversos recursos que facilitam sua operação, dispondo ainda de diversas metodologias já inclusas em seus pacotes e modelos teóricos

bem atuais; o que favorece o desenvolvimento de modelos com alto nível de complexidade de forma mais rápida. Contudo, a implementação de todas as reações químicas e os demais atributos implementados no modelo do OpenFOAM conceberia um modelo com alto requerimento de recurso computacional processual e, principalmente, gráfico; muito elevado para aplicação em simulação do equipamento de escala semi-industrial. Sua utilização deve ser especialmente útil na modelagem de componentes da dinâmica dos fluidos computacional de menores escalas, como o próprio ciclone, presente no reator objeto desta tese de doutorado. Portanto, a utilização do mesmo para a finalidade do presente trabalho ainda carece de melhorias de software e de modelo para mitigar tais dificuldades.

CAPÍTULO III

PROCEDIMENTOS TEÓRICOS E EXPERIMENTAIS

Este capítulo apresenta em sucessão as os procedimentos adotados para o desenvolvimento do modelo em CFD, detalhando em maior grau os passos que os autores consideraram de maior relevância para os objetivos do presente trabalho.

Em resumo, a primeira parte consiste em caracterizar o problema físico dos fenômenos a serem abordados para modelagem do escoamento interno do reator de gaseificação da Planta Piloto de Mauá-SP (Fig. 3.1). Em seguida, são apresentadas as hipóteses e simplificações adotadas mediante constatações das próprias simulações realizadas e de estudos da literatura acadêmica.

Com tais diretrizes estabelecidas, apresentou-se a modelagem físico-teórica e computacional, levando-se em consideração a viabilidade dos pacotes e modelos disponíveis em software e limitações relacionadas ao recurso computacional.

Desse modo, descreveu-se como foram feitas as validações do modelo desenvolvido, que envolveram etapas de simulação, comparativos qualitativos de experimentação física realizadas no reator da Planta Piloto de Mauá-SP e validação quantitativa da composição do syngas.

Por fim, os parâmetros de performance do modelo do reator foram calculados para avaliação geral de desempenho para fins de comparativo com resultados da literatura e foram produzidos resultados teste utilizando o modelo desenvolvido.

3.1. Planta Piloto de Mauá-SP

Conforme mencionado anteriormente, a tecnologia de gaseificação de CDRSU desenvolvida ao longo dos anos está sendo estudada e aprimorada, também por meio da presente linha de pesquisa.

Uma das instalações de testes construídas pela empresa resultou na Planta Piloto de Mauá-SP (Figs. 3.1 a 3.6). Diversos experimentos, com diferentes tipos de biomassa e parâmetros operacionais já foram conduzidos nesse equipamento, objeto de estudo do presente trabalho.



Figura 3.1 - Reator de escala semi-industrial para gaseificação de CDRSU em leito fluidizado. Planta Piloto de Mauá-SP



Figura 3.2 – Área externa do reator nas instalações de Mauá-SP

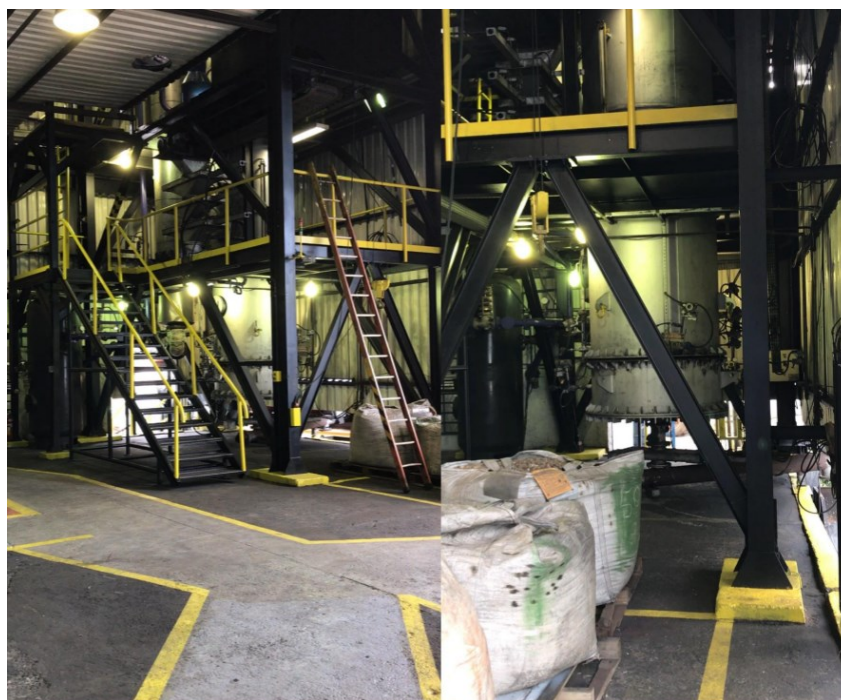


Figura 3.3 – Parte interna das instalações da planta (esquerda) e base do reator (direita)



Figura 3.4 – Sistema de extração de cinzas (esquerda) e de alimentação (direita) do reator



Figura 3.5 – Sistema de alimentação de CDRSU



Figura 3.6 – Sistema de insuflamento (esquerda) e parte do sistema de supervisão (direita)

O reator de gaseificação (9,975 m de altura e 1,460 m de diâmetro externo) é capaz de processar 296 kg/h de CDR para produzir 704 kg/h de syngas (FERREIRA et al., 2021a). Além da biomassa, o material do leito é composto por areia (sílica), calcário e por cinzas produzidas no processo. O reator de aço carbono é isolado termicamente com material refratário. Internamente, ele também contém um ciclone com canais helicoidais na parte superior e um tubo de descendente que permitem a separação de sólidos do gás. As partículas são continuamente extraídas à taxa de 79,96 kg/h de cinzas pela parte inferior do reator (Fig. 3.8). A biomassa CDR tem um poder calorífico inferior (PCI) de $14,6 \pm 1,3$ MJ/kg, umidade de 17 ± 8 wt. % e um tamanho médio de 20 mm. O ar é utilizado como agente gaseificante, insuflado a 673 K na parte inferior do reator a uma pressão de entrada de 130 kPa e taxa de 488,22 kg/h. A temperatura de operação contínua do reator é de 1.123 K e a pressão de saída do syngas medida ligeiramente acima da pressão atmosférica (INFUESTA et al., 2019b).

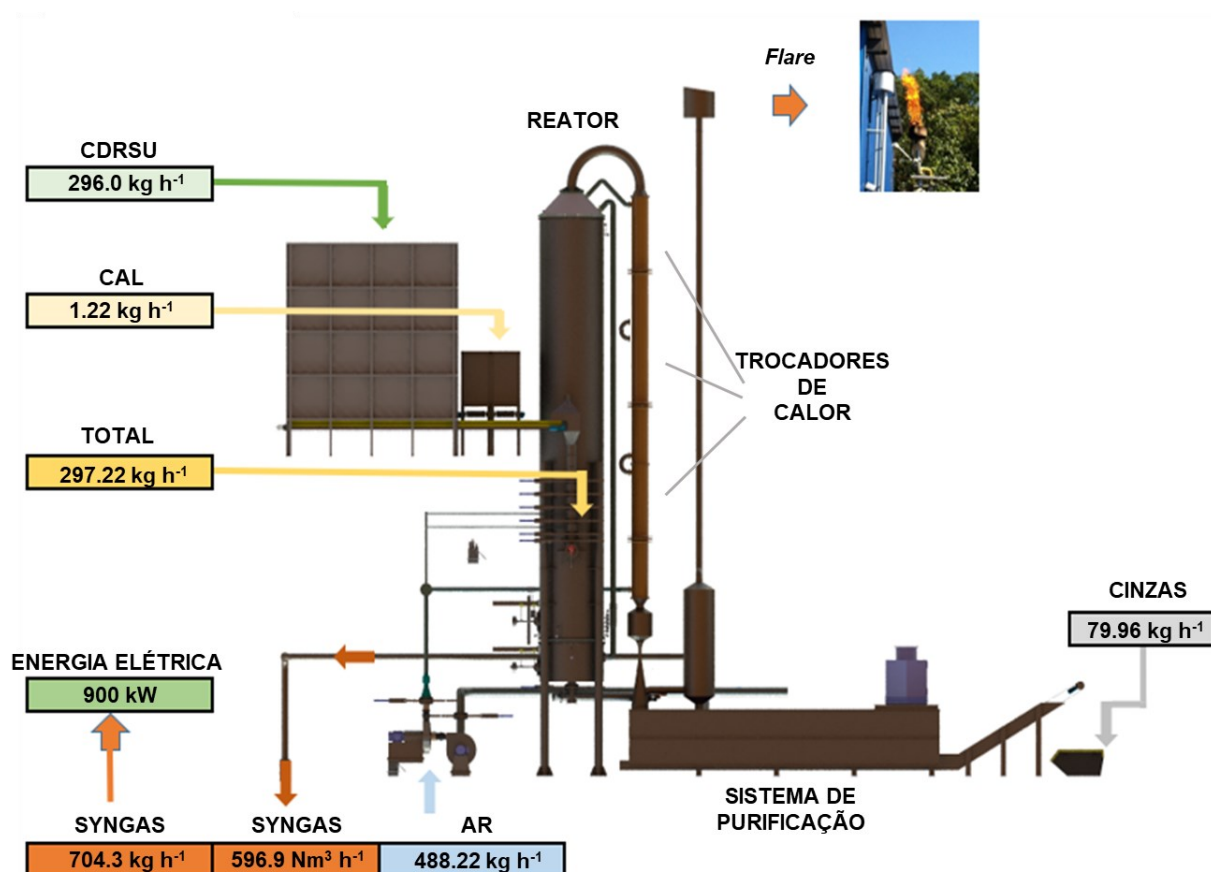


Figura 3.7 – Balanço de massa de operação em regime contínuo da Planta Piloto de Mauá-SP. Adaptado de Ferreira (2021)



Figura 3.8 – Extração de cinzas do reator

3.2. Caracterização do Problema

Em teoria, por se tratar de um sistema de alta complexidade, a avaliação das características técnicas *à priori* a serem observadas no modelo é de grande importância. O escoamento típico de reatores de gaseificação de biomassa em leito fluidizado como o do Reator da Planta Piloto de Mauá-SP, contempla os seguintes atributos e áreas do conhecimento:

- Escoamento multifásico;
- Escoamento compressível;
- Escoamento denso;
- Escoamento turbulento;
- Implementação de Modelos de Arrasto para escoamento denso;
- de Alta temperatura (efeito da radiação);
- Grande variação de propriedades termodinâmicas;
- Mudanças de fase (ex.: Reações Heterogêneas e Evaporação);
- Alta dispersão no tamanho de partículas;
- Reações Químicas (simultaneamente de redução e oxidação);
- Biomassa heterogênea de composição variável;
- Aplicação em larga escala e superestimação de modelos teóricos;
- Dificuldade de experimentação física.

Diante da variedade de temas abordados para a modelagem em questão, acima brevemente descrita, após avaliação dos trabalhos da literatura acadêmica a fim de estabelecer as diretrizes do modelo e adotar as melhores práticas utilizadas.

Verificou-se que, no geral, os trabalhos que envolvem reações químicas fazem grande uso da abordagem Euleriana-Lagrangeana (EU-LA, ou lagrangeana), uma vez que é possível avaliar cada partícula de biomassa unitariamente, sua trajetória e forças atuantes. Contudo, são trabalhos limitados em termos de produção (kg de biomassa gaseificada por hora), escala (tamanho do reator e intensidade do escoamento interno) e custo computacional, impossibilitando utilização desses modelos e submodelos em larga escala.

No presente trabalho, por se tratar de um reator de escala semi-industrial, com elevado número de partículas tanto de biomassa quanto de material de leito (areia), a utilização da abordagem EU-LA torna-se inviável. Por essa razão, optou-se pela utilização da abordagem Euleriana-Euleriana (EU-EU, ou euleriana), que modela as fases presentes (gás e sólidas) em termos da fração mássica. Essa metodologia acarreta sua maior vantagem frente ao custo computacional, em que as partículas não são calculadas individualmente, mas por meio dos volumes finitos da malha, como se fosse camadas interdependentes (Fig. 3.1) que são relacionadas numericamente por meio dos termos associados nas equações de balanço, que serão descritas na Seção 3.5.

A Tab. S1 (MONTEIRO et al., 2023) apresenta informações computacionais relatadas para alguns estudos semelhantes envolvendo simulações de leito fluidizado, bem como sua abordagem utilizada, recurso computacional disponível e tempos de simulação. A avaliação dessas informações permitiu identificar a inviabilidade da utilização da abordagem EU-LA frente à EU-EU no presente trabalho.

A abordagem utilizada no presente trabalho tem como ponto desfavorável a limitação na utilização dos modelos de reações químicas, o que excluiria os modelos de combustão, transferência de fase e de gaseificação já bem desenvolvidos sob o aspecto lagrangeano. Nesse sentido, foram adotadas algumas adaptações técnicas computacionais para contornar tais dificuldades.

Para o desenvolvimento do presente modelo, observou-se, ainda, que diversas reações intermediárias não são significativas nessa ocasião, uma vez que as espécies químicas produto não estão presentes no gás de síntese produzido, ou sua concentração no syngas é insignificante. Quanto maior for o número de reações químicas implementadas no modelo, o custo computacional tende a aumentar exponencialmente, uma vez que os cálculos de cada propriedade física são realizados em todos os volumes finitos da malha, operando proporcionalmente, conforme a seguinte equação:

$$\text{Custo computacional} \propto \left\{ \begin{array}{l} (\text{Qtd. de Propriedades Físicas}) * \\ (\text{N}^{\circ} \text{ de Volumes finitos}) * \\ (\text{N}^{\circ} \text{ de Fases}) * \\ (\text{N}^{\circ} \text{ de Espécies Químicas}) * \\ (\text{N}^{\circ} \text{ de Reações Químicas}) \end{array} \right. \quad (3.1)$$

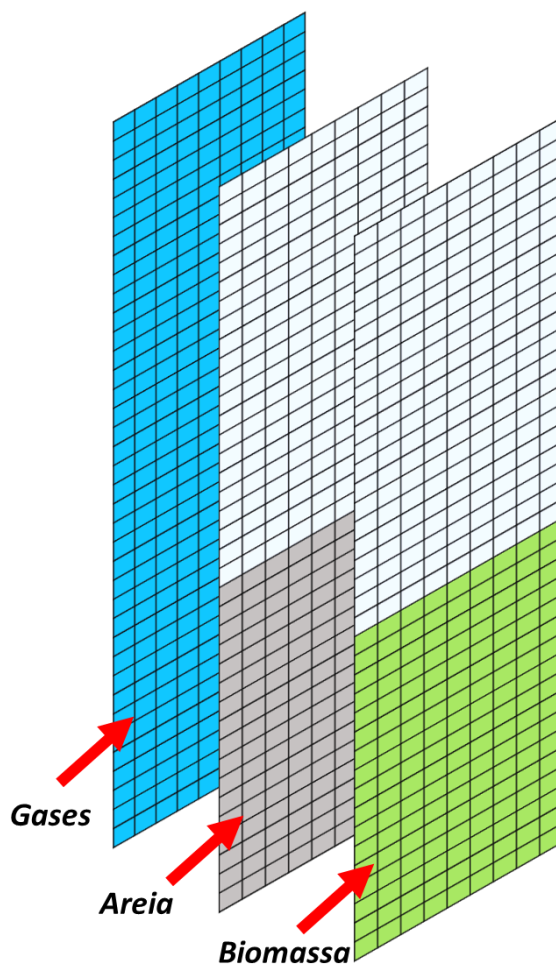


Figura 3.9 – Representação visual da abordagem Euleriana-Euleriana e as frações mássicas representadas pelas cores

Nesse sentido, as reações químicas a serem implementadas foram selecionadas com base na sua frequência de utilização nos trabalhos acadêmicos similares, na composição do gás de síntese produzido na gaseificação e sua significância no modelo.

Com as principais diretrizes do modelo estabelecidas, prosseguiu-se com o desenvolvimento do modelo utilizando-se do software OpenFOAM, versão 8.

3.3. Etapas do desenvolvimento do Modelo CFD

Procedimento adotado para o desenvolvimento do modelo CFD de reator para gaseificação:

- i. Avaliação e habituação com o software OpenFOAM, reprodução das simulações-tutoriais inclusas e análise paramétrica em modelos CFD;
- ii. Apreciação dos *solvers* e pacotes disponíveis no software (Tab. 3.1);
- iii. Seleção do **solver** desenvolvido para abordagem euleriana mais adequado e avaliação de sua formulação, com a escolha do *multiphaseEulerFoam*;
- iv. Análise de modelos prontos do software envolvendo a **abordagem euleriana** (escoamentos monofásicos com modelos clássicos da literatura, escoamento em canais, sobre superfícies etc.)
- v. Avaliação e determinação das **hipóteses simplificadoras**, com a utilização de modelos de geometrias mais simples ou 2D e de menor número de células para simulações teste;
- vi. Simulações teste com modelo 3D bifásico não reativo (gás-líquido e gás-sólido) sob abordagem Euler-Euler reproduzindo-se reatores reais da literatura para avaliação dos modelos de arrasto e da **fluidização de pequena escala**;
- vii. Estudo do **scaling-up** para avaliação da capacidade dos modelos na reprodução dos fenômenos físicos de larga escala;
- viii. Validação do modelo CFD, pacotes e métodos computacionais adotados pertinente ao fenômeno da fluidização por meio de dados experimentais da literatura;
- ix. Preparação e Implementação da **geometria e malha real** do reator da Planta Piloto de Mauá-SP. Essa etapa envolveu o estudo de diferentes tipos de volumes finitos aplicados na modelagem, vantagens e desvantagens, utilização do software gratuito SALOME e da própria plataforma de programação do OpenFOAM;
- x. Testes de **fluidização em larga escala** gás-sólido (convergência de malha, utilização de parâmetros reais, variação de parâmetros como temperatura, diâmetro de partículas, implementação de duas fases sólidas etc.);
- xi. Implementação das **Reações Heterogêneas** (isoladamente e simultaneamente):
 - a. Implementação da mudança de fase no software OpenFOAM por meio de termos fonte de massa e energia;
 - b. Programação dos cálculos de balanço de massa de cada reação heterogênea considerada no modelo termoquímico;
 - c. Verificação dos balanços e parâmetros adotados;

- xii. Implementação das **Reações Homogêneas** (isoladamente e simultaneamente);
 - a. Idem itens anteriores.
- xiii. Implementação de parâmetros experimentais reais ao modelo CFD para **validação**:
 - a. Validação do modelo numérico-computacional por meio da reprodução de trabalhos da literatura com dados experimentais de outros reatores em leito fluidizado gás-sólido;
 - b. Validação fluidodinâmica;
 - c. Validação termoquímica;
 - d. Validação experimental (composição do syngas).
- xiv. Implementação de atributos novos ao modelo, como injeção de vapor, inclusão de novas reações químicas, mudança de composição da biomassa injetada (cigarro), variação de parâmetros (ex.: temperatura, granulometria de areia, inclusão de reações, etc.).

Iterativamente, foram feitas simulações teste intermediárias com a finalidade de analisar a consistência do modelo CFD computacional. Algumas avaliações levaram a incorporação de novas hipóteses, como a exclusão da modelagem da evaporação ou a exclusão de termos fontes de energia. Visando, pois, atingir o objetivo de obter nas simulações com o modelo resultados úteis, conforme o objetivo do presente trabalho. A avaliação de termos fontes de energia é imprescindível quando da avaliação termodinâmica geral do processo de geração de energia via processo de gaseificação. Para a análise termoquímica do presente trabalho não implicou em grande impacto, uma vez que a temperatura, mantida essencialmente constante na modelagem, é o parâmetro mais determinante nas taxas de reações.

Tabela 3.1 – Solvers e pacotes disponíveis no software utilizado

Solver	Regime de Escoamento e Pacotes do OpenFOAM v8										
	Transiente	Compressível	Turbulência	Transf. de Calor	Empuxo	Combustão	Multifásico	Partícula	Malha Dinâmica	Multi-Região	fvOptions
<i>buoyantPimpleFoam</i>	✓	✓	✓	✓	✓						✓
<i>buoyantSimpleFoam</i>		✓	✓	✓	✓						✓
<i>chemFoam</i>	✓			✓		✓					
<i>chtMultiRegionFoam</i>	✓	✓	✓	✓	✓					✓	✓
<i>coldEngineFoam</i>	✓	✓	✓	✓		✓			✓		✓
<i>engineFoam</i>	✓	✓	✓	✓		✓			✓		✓
<i>fireFoam</i>	✓	✓	✓	✓	✓	✓				✓	✓
<i>icoFoam</i>	✓										
<i>interFoam</i>	✓		✓				✓		✓		✓
EulerFoam	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓		✓		✓
<i>laplacianFoam</i>	✓										✓
<i>pimpleFoam</i>	✓		✓						✓		✓
<i> pisoFoam</i>	✓		✓								✓
<i>potentialFoam</i>											
<i>reactingFoam</i>	✓	✓	✓	✓		✓					✓
<i>reactingParcelFoam</i>	✓	✓	✓	✓	✓	✓		✓			✓
<i>rhoCentralFoam</i>	✓	✓	✓	✓							
<i>rhoPimpleFoam</i>	✓	✓	✓	✓					✓		✓
<i>rhoSimpleFoam</i>		✓	✓	✓							✓
<i>scalarTransportFoam</i>	✓										
<i>simpleFoam</i>			✓								✓
<i>sprayFoam</i>	✓	✓	✓	✓	✓	✓		✓			✓
<i>XiFoam</i>	✓	✓	✓	✓		✓					✓

3.4. Hipóteses simplificadoras

3.4.1. Geométricas

Em todo modelo CFD, a geometria real deve ser isolada para definição do domínio fluidodinâmico de interesse. Por exemplo, detalhes de componentes geométricos como válvulas, ressalto, sulcos, peças de instrumentos ou objetos de pequenas dimensões comparadas à escala do equipamento são frequentemente suprimidos para criação da malha computacional. As características microscópicas, como a rugosidade de paredes internas do equipamento, caso necessário, podem ser implementadas por meio de modelos físicos para definição de condições de contorno na quantidade de movimento (atrito) e térmica (isolamento) do modelo.

Nesse sentido, a Fig. 3.10 demonstra essa idealização de um projeto em CFD. Na Fig. 3.10a, tem-se a foto do equipamento a ser implementado; (b) representa suas dimensões reais 2D; (c) sua representação geométrica em escala real no software. O reator dispõe de uma grelha de insuflamento do agente gaseificante (ex.: ar, vapor, etc.), com furos uniformemente distribuídos e de um separador de particulado sólido (ciclone) alocado internamente; e (d) as definições da malha e condições de contorno adotadas num modelo preliminar. Nessa, são definidas as principais condições de contorno, como a superfície de entrada do insuflamento (*inlet*), superfície de saída dos gases (*outlet*), superfície de fronteira do modelo (são as paredes no reator – *walls*) e o plano não obrigatório frontal de simetria. Essa malha foi adotada de forma preliminar para as primeiras simulações testes da modelagem fluidodinâmica.

Tais simulações foram essenciais para determinação de duas grandes simplificações geométricas, que consistiram na supressão da grelha de insuflamento e do ciclone separador de partículas.

Supressão da grelha perfurada de insuflamento: ao longo das simulações testes, foi observado que a grelha plana na base do reator não consiste numa geometria que favorece uma rápida fluidização do material de leito do reator. As constrições dos furos dessa geometria de insuflamento do agente gaseificante do reator causa aumento da perda de carga do mesmo e aumento da velocidade do ar, gerando maiores instabilidades no escoamento. Para a análise geral do reator em termos de sua fluidodinâmica e termoquímica, priorizou-se manter-se o leito em regime uniformemente fluidizado. Por essa razão, esse componente foi omitido na implementação da malha computacional, em que foi adotada uma superfície simples em formato anelar (ou semianular, no caso do plano de simetria), conforme a Fig. 3.10c. Contudo,

esse é um componente do reator de grande importância para o reator, objeto de muitos estudos presentes na literatura acadêmica, que buscam sua otimização geométrica.

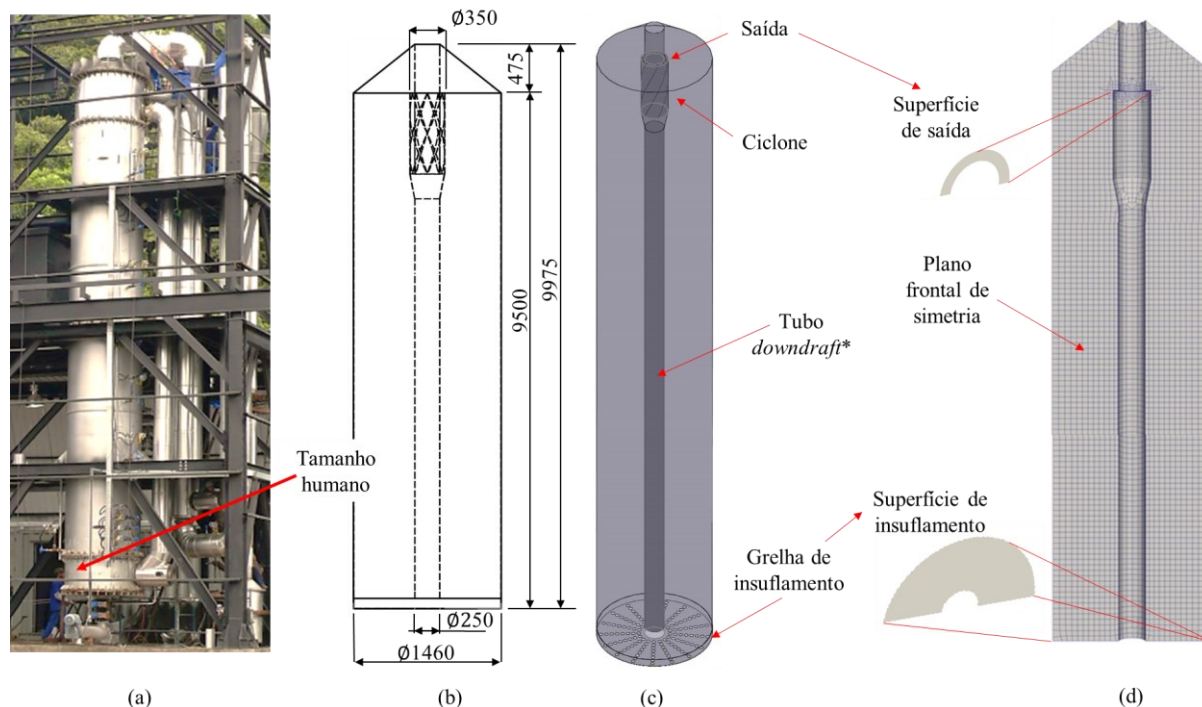


Figura 3.10. (a) Foto do reator, (b) Dimensões geométricas, (c) Geometria representativa do modelo e (d) Malha preliminar implementada para simulações

Supressão do ciclone interno do reator: devido a constrição severa de área transversal para escoamento dos gases provocada pelo componente de separação de sólidos internamente no reator, observou-se que a quantidade de momento nesse domínio é elevada a níveis em que a velocidade atinge módulos supersônicos. Essa característica tem grande vantagem na extração de particulado sólido e, eventualmente, líquidos e pastosos (alcatrão). Contudo, não tem grande significância na termoquímica do escoamento, que não favorece as reações químicas, sejam de degradação térmica do alcatrão, sejam as reações homogêneas entre as espécies gasosas presentes.

Basicamente, a quebra dos complexos compostos presentes no alcatrão pode ocorrer de duas formas: (i) pela introdução do elemento oxigênio na cadeia dos compostos aromáticos e/ou (ii) pela degradação térmica. A primeira delas necessita de teor elevado de gás oxigênio nessa região para promover localmente um ambiente oxidante, permitindo a ruptura desses componentes, principalmente os aromáticos, devido a sua grande força de ligação química. Esse mecanismo requer níveis de energia térmica suficientemente capaz de permitir que o elemento oxigênio penetre a cadeia carbônica fechada. De mesmo modo, a degradação

térmica só ocorre quando se tem temperatura elevada para que tais compostos possam ser convertidos espontaneamente à outras formas químicas.

Contudo, foi observado por meio das simulações que os teores de oxigênio presentes nessas regiões do domínio do reator são de baixa significância, resultado do controle de insuflamento de ar baseado na estequiometria química do processo de gaseificação; previsto em seu projeto. Outro agravante é que o aumento de energia cinética (ou aumento da pressão dinâmica) devido à constrição no escoamento provoca diminuição da pressão estática e da energia térmica (efeito de expansividade) local no escoamento.

Por essas razões, o componente interno denominado ciclone foi suprimido do domínio de simulação CFD por não ter grande influência na termoquímica do escoamento fluidodinâmico. Na prática, o ciclone tem a função de extrair componentes sólidos ainda presentes devido ao arraste de partículas e, eventualmente, reter resquícios de componentes líquidos e pastosos (alcatrão etc.). No entanto, ele deve ser objeto de estudo para futuros trabalhos, uma vez que pode ser otimizado no intuito de favorecer as reações químicas e, consequentemente, influenciar positivamente na composição final do gás de síntese.

Nesse sentido, a malha apresentada na Fig. 3.10d da geometria do reator foi simplificada e, foram adotadas as seguintes configurações ao longo das simulações testes e definitiva do presente modelo (Fig. 3.11 a 3.13):

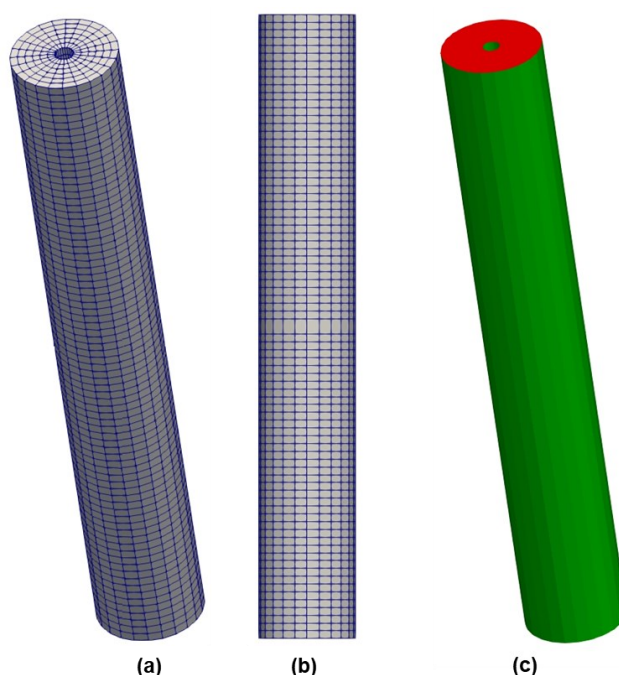


Figura 3.11 – Malha com a geometria simplificada com nível de refinamento grosseiro, exibindo (a) disposição completa das células, (b) vista frontal e (c) condições de contorno *outlet* (vermelho) e *walls* (verde)

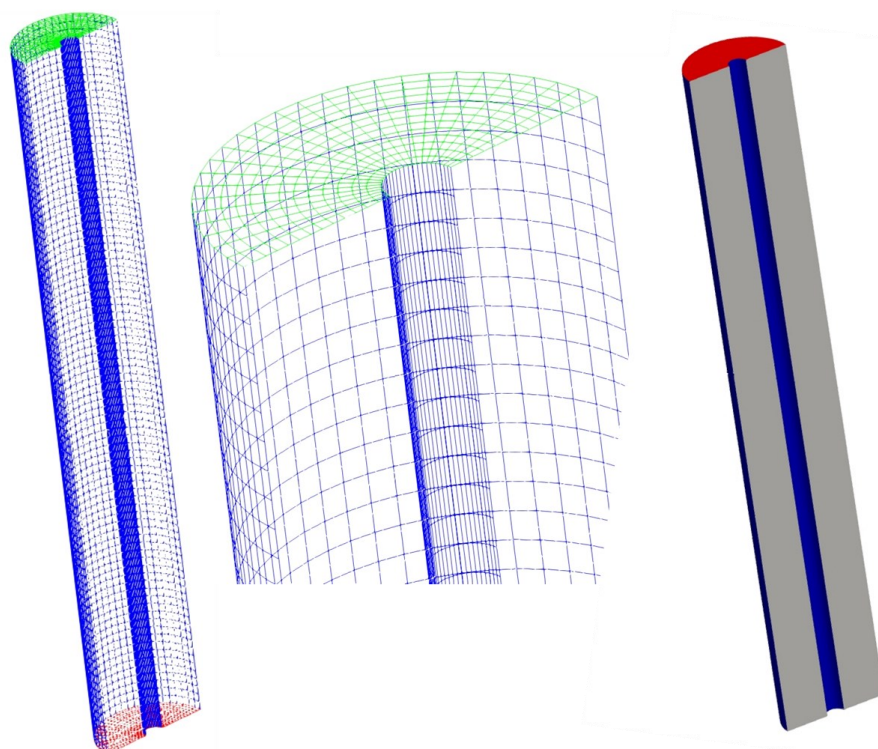


Figura 3.12 – Malha com geometria simetrizada utilizada em simulações testes, exibindo refinamento grosseiro, condições de contorno (*inlet* – verde, *outlet* – vermelho)

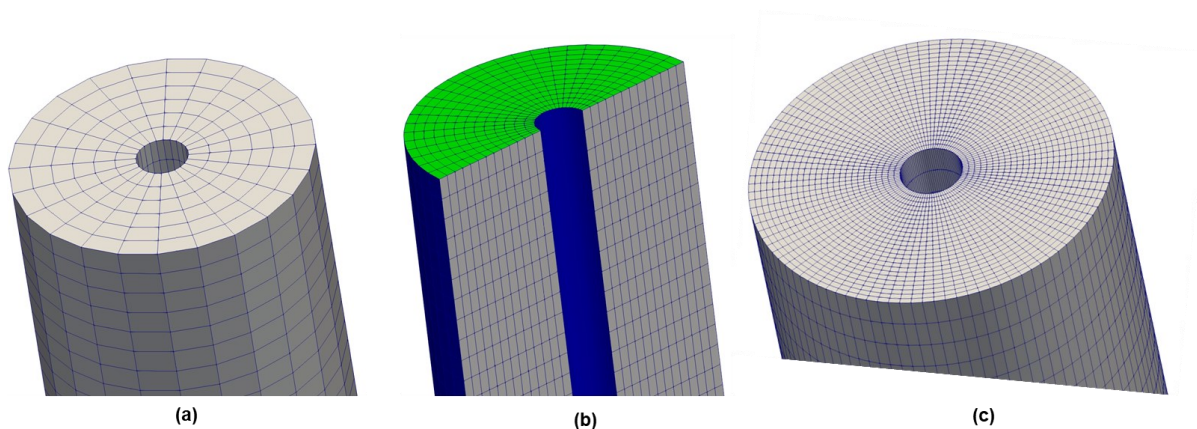


Figura 3.13 – Algumas malhas utilizadas com diferentes níveis de refinamento: (a) grosseiro, (b) intermediário e (c) fino

3.4.2. Vias de acoplamento numérico fluidodinâmico

O modelo CFD deve levar em consideração as interações entre os meios físicos possíveis. No presente trabalho, são consideradas 3 (três) fases: a fase contínua gasosa, a fase dispersa sólida de partículas de biomassa e a fase dispersa sólida de partículas de areia.

Nesse sentido, são propostas diferentes metodologias de se considerar as interações entre fases, denominados acoplamentos.

Existe o **acoplamento 1-via**, que considera nas implementações apenas as interações que o fluido causa nas partículas, não resultando em modificações na quantidade de movimento em reação dessas ações fluidodinâmicas; por exemplo, a fase contínua em movimento causa arrasto de partículas sólidas, que, por sua vez, não interferem nas velocidades da fase contínua.

O **acoplamento 2-vias** se dá quando se considera nas implementações as interações de arrasto, empuxo, massa virtual e/ou interações de tensões superficiais nas superfícies (para líquidos) de forma mútua no sistema. Nesse caso, as partículas arrastadas pela fase contínua causam variação na quantidade de movimento da fase gasosa de forma reativa ao arrasto fluidodinâmico.

No caso de se considerar tanto as interações fluido $\rightarrow$ partículas e vice-versa como também as interações entre as partículas (ex.: colisão de partículas, amortecimento, deformação e restituição), tem-se o tipo de **acoplamento 4-vias** compondo o sistema mais completo, que considera o maior número possível de interações entre os meios físicos existentes.

Conforme a Fig. 3.14, (ELGHOBASHI, 1994) propôs essa classificação em função da fração mássica do particulado sólido, de acordo com a significância que cada fenômeno interativo tem a depender do tipo de escoamento do sistema fluidodinâmico avaliado.

No presente trabalho, a fração mássica de partículas (α_p) é da ordem de 10^{-1} , variando em torno de $\alpha_p \cong 0,5$ para as partículas sólidas de areia e $\alpha_p \cong 0,15$ para a biomassa presente. Nesse sentido, a recomendação daquele autor é de se utilizar modelos que pudessem representar os fenômenos interativos por meio do acoplamento de 4-vias. Porém, conforme mencionado na Seção 2.4.3, sob abordagem Euleriana, o modelo da Teoria Cinética do Escoamento Granular (KTGF) foi desenvolvido com o intuito de representar os fenômenos colisionais entre partículas da mesma fase.

A hipótese simplificadora da presente seção consiste, pois, em (i) admitir o sistema com **acoplamento de 4-vias** utilizando a modelagem das interações sólidos $\leftrightarrow$ sólidos por meio da implementação do KTGF e (ii) considerar por meio dessa modelagem as interações entre partículas das fases sólidas distintas (biomassa $\leftrightarrow$ areia). Tal simplificação parte do pressuposto de que:

- as partículas de biomassa têm resistência e dureza bem menores que as propriedades da areia;

- considerando o escoamento denso do sistema, as interações areia $\leftrightarrow$ areia são predominantes devido ao alto número de partículas frente ao número de partículas de biomassa;
- a implementação das interações biomassa $\leftrightarrow$ areia análoga à abordagem Lagrangeana (via sistema massa-mola-amortecedor) aumentaria significativamente o custo computacional devido ao alto número de partículas sólidas;
- o método KTGF atribui boa representatividade da dissipação e transformação de energia no sistema devido ao choque de partículas.

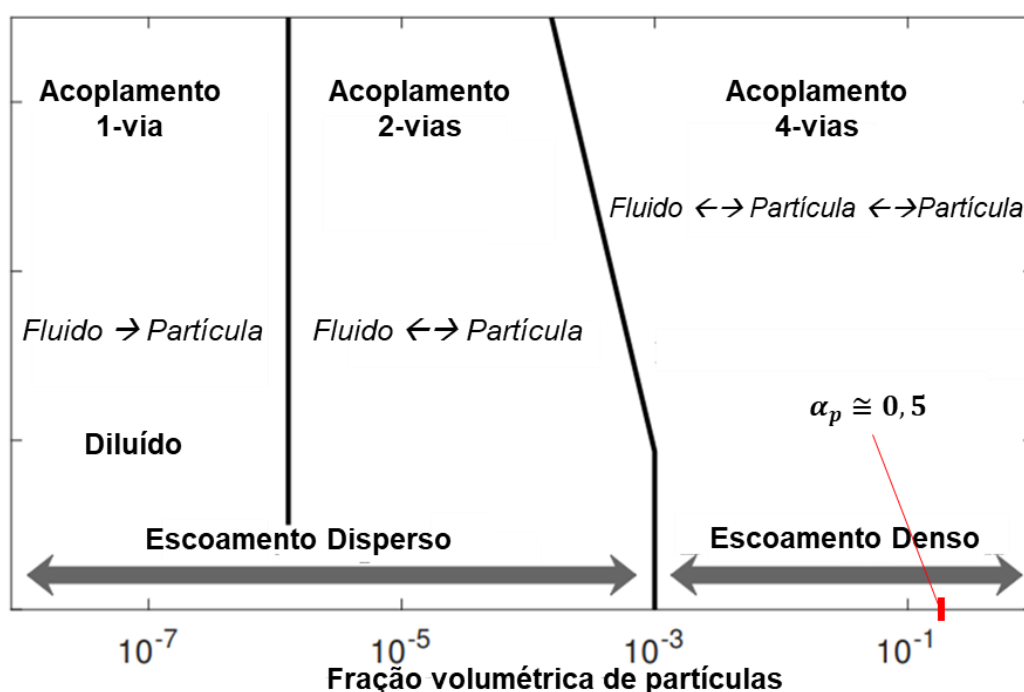


Figura 3.14 – Caracterização do tipo de escoamento em função da fração volumétrica de partículas sólidas e tipo de acoplamento a ser empregado, segundo (ELGHOBASHI, 1994). Adaptado de (NAKHAEI et al., 2020)

3.4.3. Alcatrão

A modelagem do alcatrão no presente trabalho foi desconsiderada devido ausência de alcatrão no syngas (vide Tab. 4.3). Por meio de testes empíricos, as dimensões do reator e ciclone foram otimizadas para prolongar o tempo das reações termoquímicas de forma a reduzir e eliminar o alcatrão.

No caso em tela, não há ocorrência desse componente no gás de síntese produzido, uma vez que o mesmo passa por um processo de lavagem e purificação durante o processamento. Há pontos de retenção de alcatrão, além de material sólido por parte do ciclone presente internamente no reator, favorecendo a não incidência desse componente no syngas.

Essa eficácia é também atribuída à temperatura de processo ($>800^{\circ}\text{C}$) e à presença do lavador de gases realizado após o reator e ciclone (FERREIRA et al., 2020). Além disso, testes realizados na planta piloto permitiram observar que mesmo na extração de cinzas, que ocorre antes do processo de lavagem, não há evidências de alcatrão. A única objeção constatada é o incrustamento desses compostos na entrada do ciclone e, em menor quantidade, no tubo *downdraft* do reator.

Diante do exposto, o presente modelo CFD foi desenvolvido sem a implementação desses compostos na modelagem físico-química, não sendo aplicado, portanto, qualquer dos modelos e estudos diversos encontrados sobre o tema na literatura acadêmica.

3.4.4. Hidrocarbonetos de Cadeia C_{6+}H_x (heptano e superiores)

A implementação dos compostos químicos baseados em cadeias carbônicas com número de carbono maiores que 6 (C_{6+}) – abrangendo hidrocarbonetos *n*-heptano e superiores, incluindo aromáticos e insaturados – foi suprimida no modelo CFD por razões similares às descritas na seção anterior.

Além de sua ocorrência não significativa na composição final do gás de síntese, justifica-se, pois, essa simplificação devido a contribuição também não significativa para o PCI final do syngas. O cálculo teórico de PCI feito com uma possível ocorrência de *n*-heptano (C_7H_{16}) em $\pm 0,01\%$ v/v ocasionaria aumento de $\pm 0,3\%$ no PCI do syngas.

Portanto, devido à baixa ocorrência no gás de síntese, a implementação desses compostos foi suprimida no presente modelo CFD. Assim, as espécies gasosas consideradas no presente modelo são: Vapor d'água (H_2O), Dióxido de Carbono (CO_2), Monóxido de Carbono (CO), Hidrogênio (H_2), Oxigênio (O_2), Metano (CH_4), Nitrogênio (N_2), Eteno (C_2H_4), Etano (C_2H_6) e Propano (C_3H_8).

3.4.5. Demais reações heterogêneas

Conforme mencionado na Seção 2.4.8, as reações de mudança de fase, denominadas heterogêneas, estão presentes em quase todas as etapas do processo de gaseificação em leito fluidizado e de forma simultânea, exemplificado na tabela a seguir:

Tabela 3.2 – Evaporação e Reações heterogêneas predominantes nos processos de gaseificação em leito fluidizado

Etapa	Reações Predominantes	Energia	Denominação
Secagem	$H_2O_{(l)} \rightarrow H_2O_{(g)}$	variável	Evaporação
Degradação térmica	$Biomassa_{(s)} \rightarrow C_{(s)} + Voláteis_{(g)} + Cinzas_{(s)}$	variável	Devolatilização/ Pirólise
Reações Heterogêneas	$C_{(s)} + H_2O_{(g)} \rightleftharpoons CO_{(g)} + H_{2(g)}$ $C_{(s)} + CO_{2(g)} \rightleftharpoons 2CO_{(g)}$ $C_{(s)} + 2H_{2(g)} \rightleftharpoons CH_4$	+ 131 kJ mol ⁻¹ + 172 kJ mol ⁻¹ - 74,8 kJ mol ⁻¹	Reforming of char Boudouard reaction Methanation
Combustão	$C_{(s)} + \frac{1}{2}O_{2(g)} \rightleftharpoons CO_{(g)}$ $C_{(s)} + O_{2(g)} \rightleftharpoons CO_{2(g)}$	- 111 kJ mol ⁻¹ - 394 kJ mol ⁻¹	Oxidação Parcial Oxidação

A gaseificação envolve uma série de reações endotérmicas suportadas pelo calor produzido a partir da reação de oxidação e produz gases combustíveis de interesse como hidrogênio, monóxido de carbono e metano por meio de inúmeras reações em diversas possibilidades (BASU, 2006). Porém, esses processos são resumidos por questões de modelagem e de didática a reações simples como da Tab. 3.2. A complexidade probabilística estocástica dessas reações implicaria alto custo computacional demandado pelos modelos físico-químicos, o que não é prática comum na modelagem computacional de escoamentos reativos. São utilizados, pois, métodos empíricos ou semiempíricos na determinação de constantes e taxas de reações ajustadas em equações, que auxiliam e simplificam a modelagem.

Além disso, as reações com mudança de fase na fluidodinâmica amplificam o grau de complexidade, requerendo a conversão de massa, quantidade de movimento, transferência de energia térmica e outras consequências na fluidodinâmica a ser modelada.

Aliado a esses fatores, existem a temperatura adequada para cada um dos processos envolvidos na gaseificação em leito fluidizado, incidindo diretamente nas taxas das reações apresentadas e propriedades termodinâmicas. Segundo BASU (2010) as temperaturas em que ocorrem essas etapas se dão conforme a Tab. 3.3.

Para a melhor definição e seleção de quais reações participariam da modelagem, foram feitas simulações prévias envolvendo as mais observadas na literatura, implementando-as ao modelo de forma individual e simultânea.

Tabela 3.3 – Temperaturas típicas dos processos envolvidos (BASU, 2006)

Processos	Temperaturas
Secagem	> 150 °C
Degradação térmica	150 – 700 °C
Combustão	700 – 1.500 °C
Gaseificação	800 – 1.100 °C

Esse processo iterativo consistiu em realizar-se o balanço de massa para as espécies químicas envolvidas em cada reação, analisadas de forma individual. Em seguida, com os parâmetros reais de operação do Reator da Planta Piloto de Mauá-SP, como temperatura de 850 °C e fluidização adequados, verificou-se o grau de significância na produção dos componentes do gás de síntese produzido.

Portanto, fundamentado na literatura acadêmica relacionada e nas iterações realizadas com o modelo CFD, a **devolatilização** e as reações de **Boudouard**, **Reforming of Char** e **Methanation** foram selecionadas para compor o modelo do presente trabalho.

3.4.6. Evaporação

A evaporação é um processo presente principalmente na etapa de secagem da biomassa. Essa etapa consiste basicamente na evaporação da água, que se encontra presente entre as partículas da biomassa, dentro das partículas de biomassa ou da degradação térmica de hidrocarbonetos em reação de oxidação.

A secagem pode ser implementada ao modelo CFD por meio simplesmente de um componente a mais na partícula de biomassa e uma reação química de evaporação conforme a Tab. 3.2.

Essa implementação foi negligenciada no presente trabalho pelos seguintes fatores:

- Na linha de produção de CDRSU, por meio do processamento apresentado no trabalho de (INFIESTA et al., 2019b) é prevista etapa exclusiva de secagem da biomassa, que tem sua umidade reduzida a 15 wt%;
- A umidade presente no CDRSU após seu tratamento e armazenamento pode chegar a valores até menores, conforme indicado por (MBIÉ et al., 2023), que

constatou a umidade $7,86 \pm 0,20$ wt% para o CDRSU em experimentos realizados na Universidade Federal de Uberlândia;

- Devido à alta temperatura no processo ($850\text{ }^{\circ}\text{C}$), a ocorrência das reações envolvendo H_2O é facilitada de modo que esse componente não é observado no gás de síntese produzido experimentalmente na Planta Piloto de Mauá-SP;
- A água eventualmente presente na biomassa é rapidamente evaporada ao ser alimentada no reator, que opera em temperatura constante de $850\text{ }^{\circ}\text{C}$, não se encontrando no estado líquido ou retida nas partículas.
- O efeito da expansão volumétrica desse componente na biomassa induz de forma abrupta o escoamento, alterando significativamente a quantidade de movimento do sistema, o que não condiz com a realidade.
- Pode causar instabilidades numéricas devido à mudança repentina da fase líquido para gás, inclusive ocasionando a divergência numérica do modelo.

Nesse sentido, a umidade da biomassa foi desconsiderada, uma vez que o fenômeno de evaporação não foi implementado. Em contrapartida, há produção da espécie H_2O ao longo do processo de devolatilização, reação (3.42), compensando o efeito da supressão dessa espécie na fase sólida de CDRSU e seu processo de mudança de fase.

O objetivo almejado por meio de tal supressão na modelagem CFD foi a redução da demanda de recurso computacional com o intuito de viabilizar as simulações do equipamento de larga escala. Com isso, não foi necessária a implementação de um modelo de evaporação, considerar a transferência de massa entre fases ou a modelagem transiente da água no estado líquido à $850\text{ }^{\circ}\text{C}$ e sua expansão térmica ao vapor.

3.4.7. Demais reações homogêneas

Segundo Heidenreich et al. (2016), as reações homogêneas em fase gasosa mais utilizadas na gaseificação são conforme a Tab. 3.4.

Algumas considerações foram apontadas sobre as reações homogêneas para a concepção do modelo computacional do reator de gaseificação. A primeira delas é que, para que uma determinada reação gás-gás possa ocorrer de maneira significativa no interior do gaseificados, deve haver no mesmo volume de controle quantidades significativas de cada um dos seus reagentes, de modo que, numericamente, quando o produto das frações mássicas for não nulo:

$$(\alpha_k \rho_k Y_{i,k}) \cdot (\alpha_k \rho_k Y_{i,k}) \neq 0 \quad (3.2)$$

onde α_k é a fração volumétrica da fase k , $Y_{i,k}$ a fração volumétrica da i -ésima espécie da fase k e ρ_k a massa específica da fase k .

Tabela 3.4 – Reações homogêneas típicas (HEIDENREICH; MÜLLER; FOSCOLO, 2016; WANG et al., 2023)

Tipo	Reações Predominantes	Energia
Combustão ($\rightarrow$) ou Redução ($\leftarrow$)	$H_{2(g)} + \frac{1}{2} O_{2(g)} \rightarrow H_2O_{(g)}$ $CO_{(g)} + \frac{1}{2} O_{2(g)} \rightleftharpoons CO_{2(g)}$	- 242 kJ mol ⁻¹ - 283 kJ mol ⁻¹
Reação Water-gas shift Reverse Water-gas shift	$CO_{(g)} + H_2O_{(g)} \rightleftharpoons CO_{2(g)} + H_{2(g)}$ $CO_{2(g)} + H_{2(g)} \rightleftharpoons CO_{(g)} + H_2O_{(g)}$	- 41 kJ mol ⁻¹ + 41 kJ mol ⁻¹
Reações Methane-Steam reforming	$CH_{4(g)} + H_2O_{(g)} \rightleftharpoons CO_{(g)} + 3H_{2(g)}$ $C_nH_m + nH_2O \rightleftharpoons nCO + \left(n + \frac{m}{2}\right)H_2$	+ 206 kJ mol ⁻¹ variável
Reações Dry (CO₂) reforming	$CH_{4(g)} + CO_{2(g)} \rightleftharpoons 2CO_{(g)} + 2H_{2(g)}$ $C_nH_m + nCO_2 \rightleftharpoons 2nCO + \frac{m}{2}H_2$	+ 247 kJ mol ⁻¹ variável

Nesse sentido, avaliando-se os reagentes das reações químicas presentes na Tab. 3.5, as reações mais prováveis de ocorrerem serão aquelas em que pelo menos um dos reagentes seja o agente gaseificante do reator, *i.e.*, oxigênio ou produtos derivados do oxigênio (ex.: monóxido e dióxido de carbono). Salienta-se ainda que, caso seja utilizado outro agente gaseificante, como o vapor, as reações envolvendo o reagente $H_2O_{(g)}$ serão mais frequentes em detrimento de outras.

Ademais, a implementação de tais reações se baseou na atmosfera presente no interior do reator, contendo quantidades controladas de oxigênio, apenas a necessária para manutenção da energia interna oriunda das reações exotérmicas, mantendo-se a temperatura interna em 850 °C. Portanto, as reações homogêneas de combustão não foram priorizadas no presente modelo, uma vez que o oxigênio injetado no reator teve sua estequiometria calculada para que seu consumo, na oxidação parcial da biomassa, ocorresse preferencialmente na zona primária de reações heterogêneas no leito fluidizado do reator.

Além disso, a presença simultânea dos reagentes dessas reações oxidativas (ex.: $H_2 + O_2$ e $CO + O_2$) é esparsa.

Por essa razão, apenas uma reação oxidativa foi considerada no modelo. Optou-se por utilizar as reações mais utilizadas nos trabalhos encontrados na literatura acadêmica, implementando-se as reações **methane-steam reforming**, **water-gas shift** e **Combustão de CO** (monóxido de carbono).

3.4.8. Fenômeno de *Shrinkage* (ou *Shrinking*) e a Polidispersão das partículas

O fenômeno de **shrinkage** (do inglês, encolhimento) consiste na redução gradual da partícula à medida que seus componentes sofrem a degradação térmica, liberando líquidos e gases dependendo da temperatura. Sua implementação tem grande importância pois diferentes diâmetros de partículas ao longo da gaseificação implicam em alterações no arrasto fluidodinâmico, que, por sua vez, influenciam nas taxas de reações químicas.

Em trabalhos como o de (SHAO et al., 2019), observa-se que os parâmetros da fluidização de um reator são afetados pela presença de diferentes diâmetros de partículas, como a *velocidade mínima de fluidização* (U_{mf}), os variações de pressão causada pelo leito (*pressure drop*).

Foram feitas simulações teste e reprodução de modelos computacionais de fluidização de outros trabalhos acadêmicos com o intuito de avaliar a fluidodinâmica do reator de larga escala da Planta de Mauá-SP. Para essa aplicação em específico, notou-se que a maior parte do denominado material de leito (partículas sólidas presentes) é composta pelo agente inerte areia, que não é afetado pelo fenômeno de *shrinkage*.

Para a implementação exata do fenômeno de *shrinkage* observado nas partículas de biomassa (reativa) é necessário que haja a implementação de diferentes diâmetros e sua devida distribuição estatística. Essa implementação, geralmente utilizada em modelos EU-LA, é de alto custo computacional, o que seria inviável para a simulação de larga escala. Portanto, esse a variação (diminuição) de massa da biomassa foi representada utilizando-se do recurso numérico da equação para cálculo de sua massa, conforme detalhado a seguir. A massa da partícula (m_p) é calculada por:

$$m_p = \alpha_p \rho_p V_p \quad (3.3)$$

onde α_p é a fração volumétrica da fase do particulado, ρ_p a densidade da partícula, mas o volume de partícula (V_p) considerando partículas esféricas é:

$$V_p = \frac{1}{6} \pi d_p^3 \quad (3.4)$$

portanto, a massa da partícula se resume em:

$$m_p = \alpha_p \rho_p \left(\frac{\pi d_p^3}{6} \right) \quad (3.5)$$

Nesse sentido, a variação de massa por meio da variação do diâmetro de partículas decorrente do fenômeno de *shrinkage* foi implementada por meio da diminuição da fração volumétrica na Eq. (3.5). A consequência dessa implementação é que não se terá o comportamento exato da fluidização em relação à força de arrasto sobre as partículas, nesse caso, de diâmetro constante. Contudo, é uma perda de baixa significância perante o domínio que o material inerte de leito (areia) e sua quantidade estabelecem. Mais adiante os termos fonte de massa (ou espécies químicas) aplicado às equações do modelo serão detalhados complementando a modelagem física utilizada para representar corretamente essas características de consumo e produção de propriedades (ex.: massa, *momentum* etc.).

Outra opção para a modelagem da diminuição de massa seria acrescentar uma nova equação de transporte para a densidade da partícula (ρ_p), o que também implicaria em maior custo computacional.

O diâmetro de partículas de biomassa ou de grãos de areia causam alterações significativas nos parâmetros de fluidização, portanto, sua escolha adequada é de grande importância para o modelo possa ser bem elaborado. Por outro lado, a **polidispersão** de partículas, que consiste na presença de grãos originalmente de diferentes tamanhos (ou diâmetros), também não tem grande influência naqueles parâmetros da fluidização citados em reatores de larga escala, apesar de apresentar também alterações no escoamento (SHAO et al., 2019).

Nesse caso, foi selecionado um diâmetro médio para todas as partículas, conforme informação do fornecedor desse material, uma vez que seria inviável a implementação numérica-computacional de diferentes diâmetros de grãos de areia.

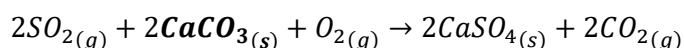
3.4.9. Reações de abatimento e compostos complexos

Visando evitar a produção de compostos químicos indesejáveis, sejam eles óxidos contendo enxofre ou nitrogênio, ácidos (fluorídrico, clorídrico), substâncias nocivas como dioxinas & furanos (LOPES; OKAMURA; YAMAMOTO, 2015; MUKHERJEE; DEBNATH;

GHOSH, 2016; TAME; DLUGOGORSKI; KENNEDY, 2007) e demais poluentes atmosféricos, em muitos processos de gaseificação, os desenvolvedores utilizam compostos químicos que reagem com essas substâncias, procedimento denominado **abatimento**.

Além dos citados, a biomassa CDRSU, de composição altamente heterogênea, pode conter metais (ex.: Cd, Ti, Hg, Pb, As, Co, Ni, Cr, Mn, Sb, Cu e V), que também podem reagir com o gás na formação de óxidos. Contudo, a consequência para a composição do syngas é de menor relevância, uma vez que são extraídos no extrator *downdraft* juntamente com as cinzas.

Os derivados de nitrogênio (NO_x) e enxofre (SO_x) são bem conhecidos e comumente proibidos por órgãos de controle do meio ambiente. Sua produção é estudada em muitos trabalhos para desenvolvimento de melhorias para os processos e sua habilitação ambiental (CHEN et al., 2018; KHAN et al., 2019; LOPES et al., 2018). Uma das práticas mais eficazes e amplamente utilizada nos processos de gaseificação para abatimento de SO_x é a adição do reagente calcário (ou cal, **CaCO₃**) no material de leito (BAN et al., 2022; CRUZ, 2018; ORÍO; CORELLA; NARVÁEZ, 1997; VARJANI, 2022). Processo representado pela reação a seguir:



Além disso, existem as possíveis reações relacionadas às substâncias químicas presentes citadas. No presente trabalho, esses compostos **não foram incluídos no modelo**, uma vez que o objetivo do trabalho não tem como ênfase o levantamento da questão ambiental e referente às substâncias nocivas. No processo de gaseificação avaliado, o que inclui o abatimento, lavagem e purificação do gás, a presença desses componentes está dentro dos níveis normativos dos órgãos ambientais (FERREIRA et al., 2021b).

3.4.10. Radiação

Esse meio de transferência de energia térmica é comumente considerado nos estudos envolvendo a gaseificação, pois, em geral, a degradação térmica de certos componentes presentes em diversas biomassas é intensificada em temperaturas acima de 400 °C, situação em que os efeitos da radiação se tornam relevantes. Para sistemas que tem temperatura operativa superiores a 600 °C e a concentração local de partículas é relativamente baixa, a contribuição da transferência de calor radiativo é importante (ZHONG et al., 2016).

Apesar de o sistema alvo do presente trabalho se tratar de um reator que opera a 850 °C, esse meio de transferência de energia térmica foi suprimido:

- (i) por se tratar de um sistema denso, inferindo-se sobre a concentração local de particulado com gradiente de temperatura elevado;
- (ii) pela baixa incidência de aglomeração, segregação ou fissão de partículas;
- (iii) por ser de temperatura quase uniforme (induzindo baixo gradiente de temperatura) no interior do reator devido à inércia térmica induzida e
- (iv) devido à alta energia turbulenta, que favorece a transferência de energia térmica por convecção forçada.

Nessa ocasião, o acoplamento de transferência de energia térmica se dá por **quatro vias** no modelo em questão, perfazendo os possíveis meios:

$$\begin{aligned} &\text{CDRSU} \leftrightarrow \text{gás} \leftrightarrow \text{areia} \\ &\text{ou} \\ &\text{areia} \leftrightarrow \text{gás} \leftrightarrow \text{CDRSU}. \end{aligned}$$

3.5. Modelo Matemático

A abordagem euleriana-euleriana resolve as equações da modelagem matemática separadamente para cada fase, neste caso a fase gás (ar) e sólido (areia). A soma da fração volumétrica de partículas das diferentes fases é sempre unitária. A formulação do modelo multifásico apresentado no presente trabalho baseia-se no trabalho de Rusche (2002). Esse autor, descreveu em sua tese de doutorado o procedimento de solução usando uma abordagem multifásica para as equações de momento, em que especificou as forças interfásicas e o algoritmo de correção de pressão para fluxos bifásicos. Assim, apenas as forças interfásicas e o algoritmo de correção de pressão foram desenvolvidos e modificados no Openfoam pelos contribuintes para a abordagem multifásica.

A equação de balanço de massa é escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_k \rho_k + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k U_k) = \dot{m}_k \quad (3.6)$$

As **equações de balanço de quantidade de movimento** para a fase gasosa (índice g) são indicadas conforme a seguir:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g U_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g U_g U_g) = \alpha_g \rho_g g + \nabla \cdot \tau_g - \alpha_g \nabla p + I_g - K_{drag}(U_g - U_s) \quad (3.7)$$

$$\tau_g = \mu_g [\nabla U_g + \nabla U_g^T] - \mu_g (\nabla \cdot U_g) I \quad (3.8)$$

E para as fases sólidas (subíndice s) conforme a seguir:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s U_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s U_s U_s) &= \alpha_s \rho_s g + \\ &= \nabla \cdot \tau_s - \alpha_s \nabla p - \nabla p_s + I_s + K_{drag}(U_g - U_s) \end{aligned} \quad (3.9)$$

$$\tau_s = \mu_{eff_s} [\nabla U_s + \nabla U_s^T] + \left(\lambda_s - \frac{2}{3} \mu_{eff_s} \right) (\nabla \cdot U_s) I \quad (3.10)$$

onde k é um índice simbólico para a fase sólida ou gasosa, *i.e.*, a fração volumétrica (α) da fase sólida é denotada por α_s , e da fase gás por α_g . Nas equações acima, α_k é a fração volumétrica, ρ_k a massa específica e U_k a velocidade da respectiva fase k . $\dot{m}_k$ é o termo fonte de massa da fase k .

A equação de balanço de quantidade de movimento (Eqs. (3.7) e (3.9)) definem τ_k como o tensor de tensões viscosas formado pela combinação das tensões médias viscosas, e turbulenta da fase gás, p a pressão, p_k a pressão granular quando (apenas) da fase sólida, λ_k a viscosidade aparente e I_k é o termo de transferência de quantidade de movimento entre fases, que inclui efeitos de arrasto, dispersão turbulenta, etc.

A turbulência foi implementada por meio do modelo das Equações Médias de Navier-Stokes (RANS). O Modelo de fechamento de turbulência padrão (LAUNDER; SPALDING, 1974) para escoamentos compressíveis, incluindo termo de compressão baseado na Teoria de Distorção Rápida (*RDT*) (EL TAHRY, 1983) é dado por meio de duas equações de transporte. A primeira, **equação de transporte de energia cinética turbulenta** (κ):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g \kappa) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g U_g \kappa) - \nabla^2(\alpha_g \rho_g D_\kappa \kappa) \\ = \alpha_g \rho_g G_g - \left(\frac{2}{3} \alpha_g \rho_g \nabla \cdot U_g \kappa \right) - \alpha_g \rho_g \frac{\varepsilon}{\kappa} \end{aligned} \quad (3.11)$$

onde D_κ é a difusividade efetiva para a energia cinética turbulenta, G_k é a taxa de produção de energia cinética turbulenta devido a parte anisotrópica do tensor de Reynolds.

Além da **equação da taxa de dissipação de energia cinética turbulenta** (ε):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g \varepsilon) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g U_g \varepsilon) - \nabla^2 (\alpha_g \rho_g D_\varepsilon \varepsilon) \\ = C_1 \alpha_g \rho_g G_g \frac{\varepsilon}{\kappa} - \left(\left(\frac{2}{3} C_1 - C_{3,RDT} \right) \alpha_g \rho_g \nabla \cdot U_g \varepsilon \right) - \left(C_2 \alpha_g \rho_g \frac{\varepsilon}{\kappa} \varepsilon \right) \end{aligned} \quad (3.12)$$

em que a viscosidade turbulenta (ν_t) é dada por:

$$\nu_t = C_\mu \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \quad (3.13)$$

onde D_ε é a difusividade efetiva para a dissipação de energia cinética turbulenta, C_1 e C_2 são coeficientes empíricos do modelo e $C_{3,RDT}$ o coeficiente baseado na RDT. Tais coeficientes de modelo são definidos por (EL TAHRY, 1983):

$$\left\{ \begin{array}{l} C_1 = 1,44 \\ C_2 = 1,92 \\ C_{3,RDT} = 0,0 \\ \sigma_\kappa = 1,0 \\ \sigma_\kappa = 1,0 \\ \sigma_\varepsilon = 1,3 \end{array} \right. \quad (3.14)$$

As fases sólidas (de subíndice g e p , respectivamente) e gasosa são acopladas por meio do termo da força de arrasto entre fases, que é função do coeficiente de arrasto (K_{drag}). O modelo de arrasto é resultante de uma combinação dos modelos de Ergun (ERGUN, 1952) (Eq. (3.15)) e de Wen Yu (WEN; YU, 1966) (Eqs. (3.16) e (3.17)). A combinação dos dois modelos de arrasto leva ao Modelo de Arrasto de Gidaspow (GIDASPOW, 1994a). Esse modelo é recomendado para escoamento denso de partículas (ZHONG et al., 2016), típico do reator analisado no presente trabalho. Nessa modelagem tem-se:

$$K_{drag} = 150 \frac{\mu_g \alpha_p^2}{\alpha_g^2 d_p^2} + 1.75 \frac{\rho_g \alpha_p}{\alpha_g d_p} |U_g - U_s|, \text{ se } \alpha_p > 0,2 \quad (3.15)$$

$$K_{drag} = \frac{3}{4} \frac{c_d \alpha_g \alpha_p \rho_p |U_g - U_p|}{d_p} \alpha_g^{-2,65}, \text{ se } \alpha_p \leq 0,2 \quad (3.16)$$

$$\begin{cases} C_d = \frac{24}{Re_p} (1 + 0,15 Re_p^{0,687}), & \text{se } Re_p < 1000 \\ C_d = 0,44 & , \text{se } Re_p \geq 1000 \end{cases} \quad (3.17)$$

$$Re_p = \frac{\rho_g d_p |U_g - U_p|}{\mu_g} \quad (3.18)$$

A equação de balanço de energia é dada na forma da entalpia como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_k \rho_k E_k) + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k U_k E_k) \\ = \alpha_k \left(\frac{\partial p}{\partial t} + U_k \cdot \nabla p \right) - \nabla (\alpha_k \kappa_{eff} \nabla T_k) + \phi + A_{sp} h (T^* - T_k) + \dot{q}_k \end{aligned} \quad (3.19)$$

κ_{eff} representa a condutividade térmica efetiva.

Na Eq. (3.10), ϕ é a dissipação viscosa e E_k a entalpia, A_{sp} corresponde à área superficial por unidade de volume da fase sólida, h é o coeficiente convectivo e T^* é a temperatura de transferência de fase adotada e $\dot{q}_k$ o termo fonte de energia térmica da fase k .

Correlação empírica usada para o cálculo do número de Nusselt (RANZ; MARSHALL, 1952) para transferência de energia térmica entre as fases:

$$Nu = 2 + 0.6 Re^{0.5} Pr^{0.33} \quad (3.20)$$

$$Nu = \frac{h d_p}{\kappa} \quad (3.21)$$

Assim, a Eq. (3.21) pode ser utilizada para obtenção do coeficiente convectivo (h) para a equação de balanço de energia (3.19). O modelo de Sutherland (SUTHERLAND, 1893) foi utilizado para avaliação da viscosidade dinâmica (μ) em função da temperatura por meio de um coeficiente empírico (A_s) e a Temperatura de Sutherland (T_s), por meio da correlação:

$$\mu = \frac{A_s \sqrt{T}}{1 + \frac{T_s}{T}} \quad (3.22)$$

As tabelas termodinâmicas (CHASE, 1998) fornecem os coeficientes polinomiais para cálculo do calor específico (c_p) em função da temperatura (T) para as simulações.

Uma das abordagens mais utilizadas é a da **Teoria Cinética do Fluxo Granular** (KTGF, do inglês *Kinetic Granular Flow Theory*), que fornece valores para o cisalhamento e a viscosidade aparente da fase sólida e também o termo de pressão sólida. Essa teoria foi baseada na Teoria Cinética dos Gases, em que o parâmetro que quantifica a energia de um sistema gasoso é a temperatura. De forma análoga, o KTGF define a propriedade denominada **temperatura granular**, que tem a finalidade de quantificar a energia de interações entre partículas de supostos grãos à abordagem Euleriana.

De acordo com a KTGF, as partículas são consideradas suaves e esféricas e as colisões são assumidas como binárias, inelásticas e instantâneas (GIDASPOW, 1994a), suposições são razoáveis em valores baixos de frações volumétricas de sólido (sistemas diluídos). Em escoamentos densos, onde as partículas estão em contato próximo umas com as outras, a maior parte da energia possuída pela fase sólida é dissipada pelo atrito superficial entre as partículas deslizantes, e não por colisões instantâneas, sendo, portanto, necessário utilizar modelos que levam em conta os efeitos de atrito gerados por tais interações e dissipação de energia (VALERIO FATTI; LUCA FOIS, 2021).

O modelo KTGF, sob a abordagem Euleriana–Euleriana, foi implementado para modelar com as fases contínua (gases) e dispersas (areia e biomassa). A seguir, foram relacionadas as principais equações dos modelos utilizados para fechamento da equação de balanço da temperatura granular. As equações podem diferir em sua forma com relação a forma mais comum encontrada em literatura, uma vez que forma apresentadas conforme a implementação ao software OpenFoam utilizado.

Equação do **balanço da temperatura granular** (VAN WACHEM, 2000):

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_s \rho_s \theta) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s U_s \theta) \right] - \nabla \cdot (\kappa_s \nabla \theta) = -(P_s I + \tau_s) : \nabla U_s - \gamma_s + J_s \quad (3.23)$$

onde o primeiro termo do lado esquerdo representa a variação de temperatura granular e a advecção dessa propriedade; o último termo do lado esquerdo representa a difusão de energia ao longo do gradiente de θ . O primeiro termo do lado direito da equação representa a criação de energia devido ao atrito entre partículas, γ_s representa a dissipação devido a inelasticidade das colisões entre partículas e J_s representa o termo fonte/sumidouro de energia granular resultante da dinâmica de interações entre partículas e gás.

A **pressão granular** (P_s) representa as forças normais devido às interações entre partículas, adquirindo a seguinte formulação de acordo com Lun; Savage; Jeffrey (1984):

$$P_s = \rho_s \alpha_s (1 + 2(1 + e) \alpha_s g_{0s}) \quad (3.24)$$

onde g_{0s} é a **função de distribuição radial** (SINCLAIR; JACKSON, 1989), e é o coeficiente de restituição, com $\alpha_{s,max}$ definido arbitrariamente:

$$g_{0s} = \frac{1}{1 - \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_{s,max}} \right)^{1/3}} \quad (3.25)$$

Conforme mencionado anteriormente, nessa ocasião, também são introduzidos na equação de balanço de quantidade de movimento (Eq. (3.9)) os conceitos de viscosidade granular aparente (λ_s , do inglês *bulk viscosity*) e viscosidade granular efetiva (μ_{effs}).

Segundo Lun; Savage; Jeffrey (1984), **viscosidade granular aparente** descreve o grau de compactação das partículas (referente a suspensão ou compressão):

$$\lambda_s = \frac{4}{3} \alpha^2 d_a g_{0s} (1 + e) \sqrt{\theta/\pi} \quad (3.26)$$

O modelo de viscosidade de (GIDASPOW, 1994a) não considera a natureza inelástica das partículas em sua contribuição às tensões viscosas, resultando na **viscosidade granular efetiva** (μ_{effs}) conforme a seguir:

$$\frac{\mu_{effs}}{\rho_s} = d_a \sqrt{\theta} \left[\frac{\frac{4}{5} \alpha_s^2 g_{0s} (1 + e)}{\sqrt{\theta/\pi}} + \frac{1}{15} \sqrt{\pi} g_{0s} (1 + e) \alpha_s^2 + \frac{1}{6} \sqrt{\pi} \alpha_s + \frac{10}{96} \frac{\sqrt{\pi}}{(1 + e) g_{0s}} \right] \quad (3.27)$$

Também foi utilizado o modelo de (GIDASPOW, 1994a) para **condutividade da energia granular** (κ_s) utilizado, implementado no OpenFoam da seguinte forma:

$$\kappa_s = \rho_s d_a \sqrt{\theta} \left[\frac{2 \alpha_s^2 g_{0s} (1 + e)}{\sqrt{\pi}} + \frac{9}{8} \sqrt{\pi} g_{0s} 0.5 (1 + e) \alpha_s^2 + \frac{15}{16} \sqrt{\pi} \alpha_s + \frac{25}{64} \frac{\sqrt{\pi}}{(1 + e) g_{0s}} \right] \quad (3.28)$$

Para a dissipação/geração de energia granular devido a inelasticidade das colisões entre partículas (γ_s), Lun; Savage; Jeffrey (1984) definiram:

$$\gamma_s = 12(1 - e^2) + \frac{\alpha_s^2 \rho_s g_{0s}}{d_a \sqrt{\pi}} \theta^{3/2} \quad (3.29)$$

Em se tratando ainda das interações entre partículas para o escoamento denso, seu comportamento não é idealmente descrito pelo KTGF, que assume as colisões de forma binária e instantânea, mas é influenciado pelo contato contínuo (ou frequente) entre partículas (PASSALACQUA; MARMO, 2009). Uma das abordagens utilizadas para representar esse fenômeno é a utilização de um tensor de tensões considerado como um meio plástico contínuo de escoamento (GIDASPOW, 1994a); onde haveria uma tensão de coesão (k_f) – que assume valor nulo em partículas não coesivas –, ângulo de fricção (φ_f) e a tensão normal ($\sigma_{s,f}$):

$$\tau_{s,f} = \sigma_{s,f} \tan \varphi_f + k_f \quad (3.30)$$

dessa forma, o tensor (k_t) implementado no KTGF (Eq. (3.23)) é denotado como $k_{s,kt}$ na equação seguinte:

$$\tau_s = \tau_{s,kt} + \tau_{s,f} \quad (3.31)$$

De forma análoga à implementada no balanço de quantidade de movimento (Eq. (3.10)), o denominado tensor friccional ($\tau_{s,f}$) é dado por:

$$\tau_{s,f} = P_{s,f} I - \mu_{s,f} [\nabla U_s + (\nabla U_s)^T] \quad (3.32)$$

onde tem-se também a pressão (granular) friccional ($P_{s,f}$) e a viscosidade (granular) friccional ($\mu_{s,f}$). De acordo com a contribuição empírica de Schaefer (1987):

$$P_{s,f} = \begin{cases} 0 & , se \alpha_s < \alpha_{s,f,min} \\ 10^{25} \alpha_s (\alpha_s - \alpha_{s,f,min})^{10} & , se \alpha_s \geq \alpha_{s,f,min} \end{cases} \quad (3.33)$$

$$\mu_{s,f} = P_{s,f} \frac{\sqrt{2} \sin \varphi_f}{2 \sqrt{S_s : S_s}} \quad (3.34)$$

3.6. Fluidização

Na literatura acadêmica não foram encontrados trabalhos envolvendo a fluidização em reatores de larga escala, fato que motivou uma avaliação mais aprimorada do reator objeto desta tese de doutorado em termos de sua fluidodinâmica e de como os modelos comumente utilizados para simulações CFD em pequena escala se comportariam quando aplicados em simulações com geometria real, de modo a produzir resultados relevantes para o estudo do presente trabalho.

Analizou-se, portanto, o fenômeno de fluidização do reator, da Planta Piloto de Mauá-SP, primeiramente, apenas em termos fluidodinâmicos, desconsiderando as reações químicas, com o intuito de aplicar a abordagem euleriana nesse reator (de escala semi-industrial) e verificar a consistência de seus resultados. Sua geometria foi inserida no software em tamanho real em suas condições normais de operação. Todas as simulações foram conduzidas utilizando o software livre OpenFOAM® v8 e os resultados foram analisados pelo software ParaView®.

Por meio do estudo realizado nessa etapa, foi elaborado o artigo científico (MONTEIRO et al., 2023), de cunho referente unicamente à fluidização em reatores de larga escala:

MONTEIRO, V. A. L.; REIS, M. G. A.; INFIESTA, L. R.; FERREIRA, C. R. N.; DOS SANTOS, M. B.; TROVÓ, A. G.; CARVALHO, S. R. *Eulerian computational fluidisation modelling using OpenFOAM applied to a semi-industrial fluidised bed reactor and pilot plant application*. **Cleaner Chemical Engineering**, v. 5. p. 100089, 2023.
<https://doi.org/10.1016/j.clce.2022.100089>

Kunii e Levenspiel (1991) categorizaram o escoamento em diversos regimes de fluidização dependendo da quantidade de movimento envolvida, conforme a Fig. 3.15, que puderam ser observados de forma clara durante as simulações teste do modelo computacional.

Outro aspecto de grande relevância é a identificação da velocidade mínima de fluidização (u_{mf}) do reator de larga escala, que determina o valor de velocidade a partir do qual (ponto A da Fig. 3.16) o seu aumento não causará variação significativa na queda de pressão do leito do sistema (Δp – *pressure drop*). Para a determinação dessas características, os modelos de arrasto fluidodinâmico mais utilizados foram avaliados para o sistema de escala real, inclusive avaliando-se a influência da temperatura nesses modelos.

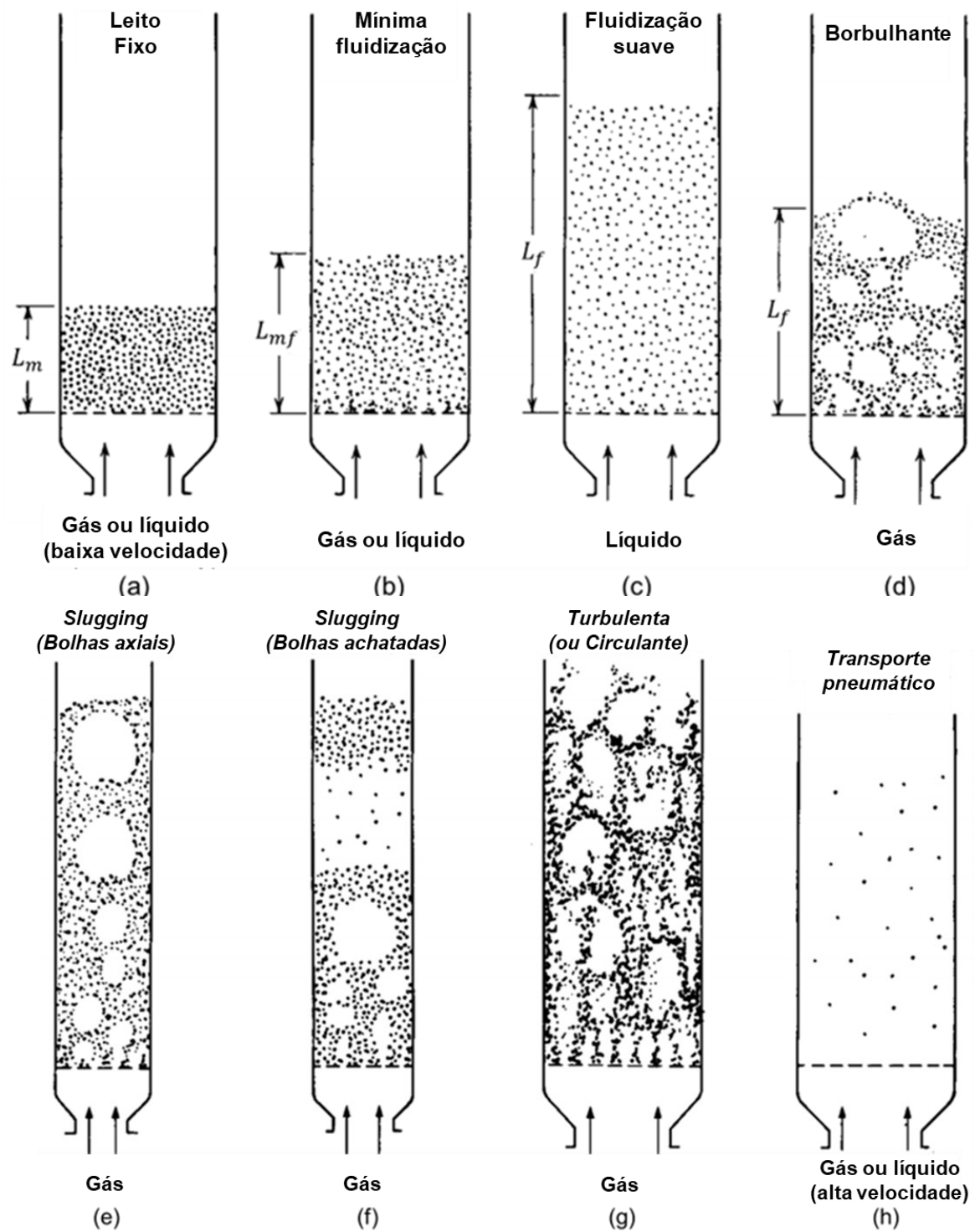


Figura 3.15 – Regimes de escoamento (KUNII; LEVENSPIEL, 1991)

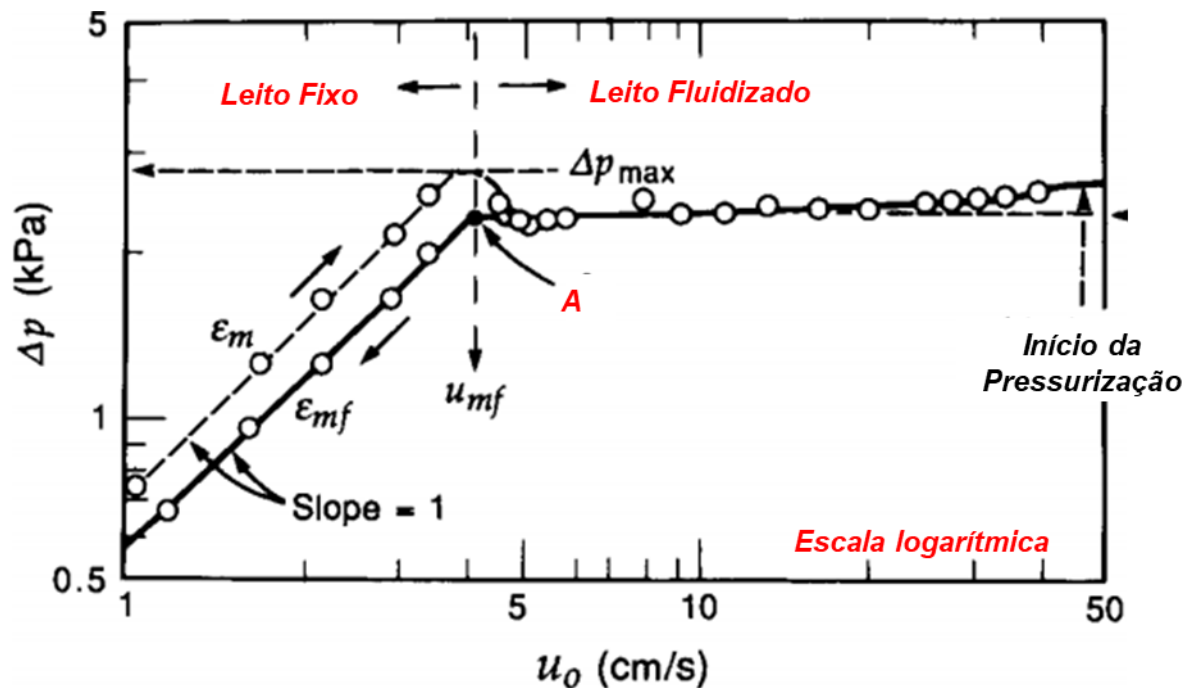


Figura 3.16 – Comportamento da diferença de pressão (Δp – *pressure drop*) em função da velocidade de insuflamento (u_0). Adaptado de Kunii e Levenspiel (1991)

Nessa etapa, ainda, as informações de operação do Reator da Planta Piloto de Mauá-SP foram essenciais para a determinação de condições iniciais (quantidade de material de leito inicialmente inserida ao reator, pressão de insuflamento) e parâmetros da fluidização (*pressure drop* e velocidades de insuflamento envolvidas), que são demonstradas em maiores detalhes na seção 3.6.1 a seguir, contendo um estudo de caso desenvolvido para a presente avaliação de fluidização de larga escala.

3.6.1. Estudo de Caso e Modelo Físico de Fluidização

Para analisar a fluidodinâmica interna do gaseificador, foi desenvolvido um modelo simplificado bifásico contendo apenas a fase contínua de gases e a fase dispersa de partículas sólidas. Assim, o material do leito, que normalmente é composto de biomassa, cinzas e partículas de areia, foi reduzido a apenas uma fase sólida com as características da areia e a fase gasosa foi representada pelo ar.

O desenvolvimento da modelagem de fluidização do sistema de escala semi-industrial consistiu nas seguintes etapas:

- (i) Estudo de *Scaling-up* do sistema de fluidização do reator de escala semi-industrial da Planta Piloto de Mauá-SP e seleção de trabalho(s) da literatura com comportamento fluidodinâmico semelhante(s), segundo Yang (2003);
- (ii) Reprodução e validação do sistema fluidizado do reator de menor escala de trabalho(s) da literatura que envolvem a validação experimental.
- (iii) **Validação qualitativa** do fenômeno de fluidização do reator de escala semi-industrial da Planta Piloto de Mauá-SP por meio de vídeo-captura coletada experimentalmente.

A Fig. 3.10 e a Tab. 4.2 apresentam as dimensões do reator termoquímico, da malha numérica e das condições de limite adotadas nas simulações. As etapas (i) e (ii) foram incluídas na Seção 4.1.1 do Capítulo III e também em trabalho publicado do presente autor (MONTEIRO et al., 2023) e etapa (iii), de validação qualitativa, encontra-se na Seção 4.1.2.4.

Computacionalmente, a biomassa foi implementada no modelo como um termo constante de fonte de massa, anexado à fase de ar nas simulações, representando o CDRSU, que é convertido nos gases de interesse, compondo o syngas. Seu valor numérico foi calculado com base no fluxo de massa da produção de syngas de 704,3 kg/h e no fluxo de massa de ar insuflado, de 488,4 kg/h (Fig. 3.7). Este termo fonte é definido pela Eq. (3.35):

$$\dot{m}_g = \dot{m}_{syngas} - \dot{m}_{air} \quad (3.35)$$

onde $\dot{m}_g$ é o termo fonte de massa a ser calculado, $\dot{m}_{syngas}$ o fluxo de massa de gás liberado pelo reator e $\dot{m}_{air}$ o fluxo de massa de ar insuflado no reator.

Para este estudo, não foram implementadas reações químicas. Assim, o fluxo de massa de cinzas e calcário da planta semi-industrial foi negligenciado, devido à ausência de formação de produtos químicos nesta modelagem. Assim, o material de leito consiste apenas em areia, com uma massa específica de 1.660 kg m⁻³ e um diâmetro de grãos de 0,5 mm.

A quantidade de areia inicialmente contida no reator foi determinada por simulações, com base em informações experimentais sobre a pressão de entrada (130 kPa), pressão de saída (101,325 kPa) e velocidade do ar. Uma vez que a queda de pressão do leito fluidizado é aproximadamente linear com a altura do leito, este parâmetro foi calculado por regressão linear, obtendo-se a Eq. (3.36):

$$\Delta p = 2.811,8h_{bed}^o + 19.523 \quad (3.36)$$

onde Δp é a diferença de pressão causada pelo escoamento sobre as partículas e h_{bed}^o a altura inicial de areia contida no leito do reator. Nesse caso, a Eq. (3.36) resulta em uma altura de leito igual a 3,25 m. Dessa forma, calcula-se a quantidade de areia (m_{sand}) contida no reator pela equação:

$$m_{sand} = h_{bed}^o A_d \alpha_{particles} \rho_{sand} \quad (3.37)$$

onde A_d é a área de seção transversal do reator relativa ao seu diâmetro (d), $\alpha_{particles}$ a fração volumétrica da fase sólida (adotada como 0,55 por meio de informações da literatura quando da sua compactação natural) e ρ_{sand} a massa específica da areia. A fração de vazio (ϵ), fração volumétrica média da fase gasosa do leito (fração ocupada por espaços vazios entre partículas) foi calculada por:

$$\epsilon = 1 - \frac{m_{sand}/\rho_{sand}}{h_{bed}^o A_d} = 1 - \alpha_p \quad (3.38)$$

em que se obtém a fração de vazio mínima de fluidização (ϵ_{mf}), determinada pela integração dos volumes finitos da região do leito quando esse se apresenta em seu estado de máxima densidade aparente.

A velocidade superficial (U_s) de insuflamento de ar é calculada por:

$$U_s = \frac{\dot{m}_{air}}{\rho_{air} A_d} \quad (3.39)$$

O termo de fonte de energia, anexado à fase contínua do gás, foi estimado por meio das informações do PCI da biomassa e do syngas obtido e vazões mássicas, desconsiderando as perdas, em que:

$$\dot{q}_k = \dot{q}_{OUT} - \dot{q}_{IN} = \dot{m}_{syngas} PCI_{syngas} - \dot{m}_{biomassa} PCI_{biomassa} \quad (3.40)$$

Devido às altas velocidades nos leitos fluidizados, os fenômenos da turbulência assumem papel essencial no escoamento em questão. Por isso, foi adotada uma malha 3D, que são menos sensíveis a questões numéricas, para obter resultados fisicamente realistas (SHI; KOMRAKOVA; NIKRITYUK, 2019). A geometria do reator de planta piloto original (Fig. 3.10a) foi simplificada adotando-se um corte simétrico no plano frontal (Fig. 3.10c), que mostra

também a seleção dos principais limites. Portanto, as superfícies de entrada e saída do equipamento são círculos anulares (Fig. 3.10b), correspondentes respectivamente à entrada do reator e à abertura ao ciclone do reator. O ciclone não foi adicionado à geometria da simulação por razões de simplificação. A simulação desse componente exigiria melhor refinamento de suas células, devido à alta velocidade observada nessa região devido a redução da área da seção, e essa condição não corresponde ao objetivo desta etapa do trabalho, que é investigar o padrão de fluidização do leito. A malha obtida (Fig. 3.10c) é composta por 61.744 células hexaédricas e algumas células prismáticas devido a pequenos ajustes de borda, mas todas as regiões de malha têm o mesmo grau de refinamento. A geometria foi desenvolvida por meio do utilitário *snappyHexMesh* do software OpenFOAM®.

As simulações preliminares do presente trabalho foram realizadas para mapear os regimes de fluidização do reator, de escala semi-industrial. Em seguida, foi simulado em sua condição de operação contínua. Além das simulações, o reator da planta piloto foi testado experimentalmente em durante sua partida, em que foram obtidas imagens de uma câmera de vídeo posicionada no seu interior. Devido a dificuldades técnicas, essa experimentação foi realizada à temperatura ambiente e, portanto, sem reações químicas. Tal experimento teve o intuito de analisar qualitativamente as características de fluidização, pressão de entrada e velocidades, além da quantidade de material de leito inicialmente contida no reator. O material de leito utilizado foi composto de areia e CDRSU.

3.7. Modelagem do CDRSU

O RSU é um resíduo oriundo do descarte de materiais inservíveis para consumo residencial, sua composição é altamente variável e difícil de se definir um padrão ou faixas de variações para os inúmeros componentes possíveis.

Seus componentes principais envolvem matéria orgânica (úmida e seca), papel, papelão, componentes têxteis, plásticos, vidros, metais etc. Podendo ainda conter, eventualmente, terra, areia, cinzas, descartáveis com risco biológico ou até mesmo radioativos. Contudo, são materiais que a indústria fabricou arcando com custos produtivos, originários de recursos naturais (petróleo, celulose etc.). Portanto, são materiais que, de certa forma, têm valor agregado que permitiria sua recuperação energética.

Ademais, o teor desses materiais é variável, dependendo inclusive da época do ano, local de deposição, nível educacional, efetividade de campanhas de reciclagem e, até mesmo, tem relação com o Índice de Desenvolvimento Humano (IDH) do país/cidade/bairro origem desse dejetos.

Por essa razão, o RSU é considerado uma matéria prima heterogênea e seu processamento termoquímico torna-se complexo devido à essas características. Nesse sentido, para sua utilização na gaseificação e seu aproveitamento energético, faz-se necessário o processamento e tratamento desse material. Assim, foi desenvolvida uma linha de produção em larga escala para o processamento e o adequado preparo dessa matéria prima para a gaseificação, por meio da produção do Combustível Derivado de Resíduos Sólidos Urbanos (CDRSU) (INFIESTA et al., 2019b).

A gaseificação inclui subprocessos baseados na secagem, degradação térmica e reações químicas em alta temperatura. Portanto, os materiais de interesse para esse processo são aqueles com poder calorífico (papéis, plásticos etc.), excluindo materiais como vidros, pedras e metais, por exemplo.

A linha de processamento e tratamento desenvolvida (Fig. 3.17) tem como objetivo transformar o RSU em CDRSU, com o intuito de uniformizar sua composição, eliminando seus inconvenientes como a umidade, metais, pedras e vidros, além de regularizar o tamanho de suas partículas, por meio dos processos de trituração.

O resíduo tem umidade média em torno de 50 wt% e poder calorífico inferior (PCI) de aproximadamente $9,3 \text{ MJ kg}^{-1}$ e, após o tratamento, atinge umidade menor que 10 wt% e PCI de $14,6 \text{ MJ kg}^{-1}$, além de seu aspecto padronizado com dimensões em torno de 25 mm (Fig. 3.18).

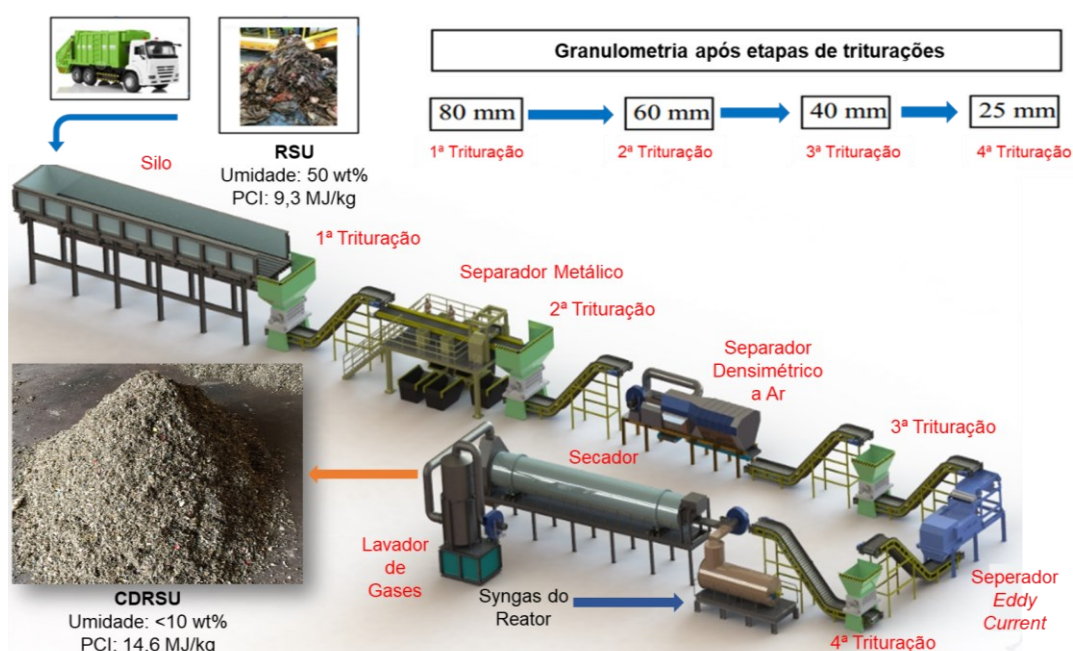


Figura 3.17 – Processamento da biomassa instalado na Planta Piloto de Mauá-SP (FONTE: Relatório de Caracterização dos Resíduos de Boa Esperança Planex Contrato CT 001/2009)



Figura 3.18 – Combustível Derivado de Resíduos Sólidos Urbanos (CDRSU) obtido por meio da tecnologia da presente linha de pesquisa (INFIESTA et al., 2019b)

A modelagem do CDRSU é feita por meio da sua caracterização (Tab. 3.5), que contém as informações dos componentes principais – categorizados em termos da umidade, quantidade de voláteis, cinzas e carbono fixo – necessárias para sua degradação térmica. A Tab. 3.6 contém as informações obtidas pela Análise Elementar do CDRSU.

Tabela 3.5 – Análise Imediata da biomassa CDRSU produzido por matéria prima originária de diferentes fontes (50% das ruas e 50% de aterro sanitário ou de apenas um tipo)

Análise imediata (%)	50% rua 50 aterro	100% aterro	100% rua	Valor Médio	Metodologia
Umidade (m/m)	15	9,9	25	$16,6 \pm 7,7$	NBR 8293
Materiais voláteis (m/m)	NI	NI	NI	NI	N/A
Cinzas (m/m)	26	27	15	$22,7 \pm 6,7$	NBR 8289
Carbono fixo (m/m)	57	47	58	$54,00 \pm 6,08$	ASTM 5865
PCI (MJ kg^{-1})	15,78	14,82	13,21	$14,6 \pm 1,3$	ASTM 5865

Tabela 3.6 – Análise Elementar da biomassa CDRSU

Análise Elementar (wt%)	CDRSU ¹	50% rua 50 aterro	100% aterro	100% rua	Valor Médio ²
Carbono	$54,4 \pm 0,07$	57	47	58	$54,00 \pm 6,08$
Hidrogênio	$8,4 \pm 0,1$	7	7	8	$7,33 \pm 0,58$
Nitrogênio	$0,8 \pm 0,2$	1	0,81	0,81	$0,87 \pm 0,11$
Oxigênio	$34,9 \pm 0,3$	35	45	33	$37,67 \pm 6,43$
Enxofre	$1,5 \pm 0,02$	0,11	0,11	0,1	$0,11 \pm 0,01$

¹ (DA SILVA, 2021)

² Análise subcontratada junto ao Laboratório Associação Brasileira de Cimento Portland - Credenciado no Cgcre ISO/IEC. Metodologia: ASTM 5865.

No presente modelo, considerando a abordagem EU-EU utilizada, a fase referente à biomassa é modelada por meio de um modelo de mistura multicomponentes. A mesma foi definida contendo 03 (três) espécies: biomassa (consumível), carbono fixo (carvão) e cinzas (do inglês, *ash*). Assim, com exceção das cinzas, a biomassa é modelada inserindo-se os valores médios da Tab. 3.5 à fração mássica das espécies da fase que representa as partículas de biomassa.

Conforme descrito na seção 3.4.6, a umidade poderia ser modelada acrescentando-se uma espécie na fase partícula para representar o efeito da evaporação, que foi suprimido no presente modelo. Ademais, como no syngas produzido não foi observada quantidade significativa de vapor d'água ($H_2O_{(g)}$), sua supressão foi adequada para reduzir o custo computacional das simulações.

Para as simulações, o software é configurado com a **fração mássica** da fase partícula e de seus componentes de acordo com o somatório dos valores médios obtidos na análise imediata, com exceção das cinzas, que é produto da degradação térmica da biomassa e não existe inicialmente no reator. Também não há a presença do carbono fixo, porém, no presente modelo, ele foi inserido para inicializar as reações heterogêneas envolvendo o carvão ($C_{(s)}$).

Portando, a modelagem de diferentes biomassas ao modelo pode ser feita mediante ajuste simples das frações mássicas dos componentes envolvidos e avaliação das reações envolvidas na operação do reator em regime permanente.

3.8. Modelagem Termoquímica

Essa etapa do trabalho aborda não apenas a fluidização do reator como também dá início às implementações das reações químicas do processo. Para tais implementações, observou-se na literatura acadêmica as diversas linhas de pesquisa aplicadas à gaseificação de diferentes biomassas, utilizando-se diversas abordagens, metodologias e tecnologias. Sob a abordagem euleriana (EU-EU), a modelagem dos processos químicos é menos ocorrente nos trabalhos de pesquisa. Ademais, existem linhas de pesquisa com enfoques em subprocessos com particularidades, como a pirólise (DING et al., 2020; VERISSIMO; LEIROZ; CRUZ, 2020; YANG; WANG; WANG, 2021), reatores de leito fixo (ÁLVAREZ-BERMÚDEZ et al., 2023; DIYOKE et al., 2018), emissões de poluentes (COLPANI et al., 2022; SOLER et al., 2018), simulações termodinâmicas (DAS; BHATTACHARYA; DATTA, 2020; DÍAZ GONZÁLEZ et al., 2023; MAVUKWANA et al., 2021). Contudo, não são trabalhos envolvendo a modelagem de um sistema completo abordando todas as complexidades necessárias ao processamento termoquímico.

Assim, desenvolveu-se no presente trabalho uma proposta de simulação simplificada, porém, que pudesse representar detalhes relevantes ao modelo sem perder informações importantes à presente análise e produzindo resultados coerentes e de proveito.

Dessa forma, o processo de modelagem da gaseificação desenvolvido foi resumido na Figura 3.19, que demonstra de forma simplificada os subprocessos envolvidos na pirólise e gaseificação implementados, necessários para a representação de um reator real de recuperação de resíduos.

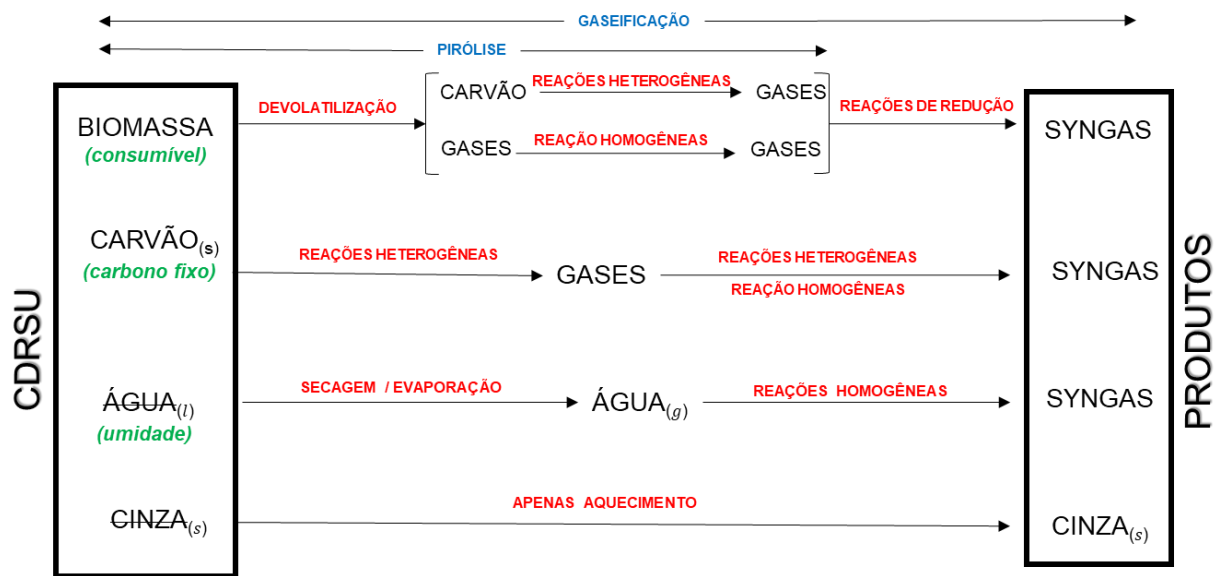


Figura 3.19 - Detalhamento dos subprocessos da gaseificação e pirólise de biomassa para implementação. Os componentes de água foram suprimidos na composição do CDRSU e a fração mássica de cinzas é inicialmente nula

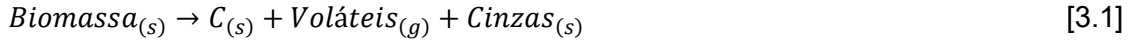
3.8.1. Equação do Balanço de Espécies

A equação do balanço de fração mássica de espécies (Y) é escrita por:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_k \rho_k Y_{i,k}) + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k U_k Y_{i,k}) = \nabla (\alpha_k \rho_k D_{eff} \nabla Y_{i,k}) + \dot{m}_{p \rightarrow i,k} \quad (3.41)$$

onde o termo da fonte de massa é denotado por $\dot{m}_k$, enquanto $\dot{m}_{p \rightarrow i,k}$ denota o termo de transferência de massa entre fase dos produtos de partículas de biomassa (p) convertidos na i -ésima espécie da k -ésima fase, sendo a fase gasosa ($k = 2$). D_{eff} é a difusividade efetiva de massa da i -ésima espécie.

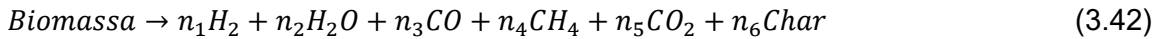
A equação do balanço de espécies se dá pela necessidade de transferência de massa entre espécies requerida pelas reações químicas implementadas ao modelo. Conforme mencionado nas seções anteriores, para a conversão de fase sólida, as reações químicas heterogêneas escolhidas para representar a termoquímica interna do reator de gaseificação são:



A Reação [3.1] representa a devolatilização, a reação *Reforming of Char* [3.2], a reação de *Boudouard* [3.3] e a reação *Methanation* [3.4]. A conversão de massa se dá por meio do cálculo de $\dot{m}_{p \rightarrow i,k}$ em cada espécie envolvida em cada reação química, aplicada também a cada fase reativa do modelo. De modo análogo, a energia (ΔH) liberada ou consumida atrelada a cada reação química é implementada ao modelo por meio do termo fonte de energia ($\dot{q}_k$) na equação de balanço de energia Eq. (3.19).

3.8.2. Devolatilização

A reação simplificada resultante para a liberação dos produtos de devolatilização (QI et al., 2019) é dada por:



onde as constantes n_i são definidas de acordo com as taxas de devolatilização adotadas (QI et al., 2019).

Na abordagem EU-EU, o processo de devolatilização pode ser modelado por meio da implementação de termos fonte de massa e de energia, anexados às equações de balanço de massa, de espécies e de quantidade de movimento. Para tal implementação, há a necessidade da transferência de fase, para contemplar a transferência de massa da partícula de biomassa (índice p) para seus produtos entre fases ($\dot{m}_{p \rightarrow k}$) na Eq. (3.6), resultando em:

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_k \rho_k + \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_k \rho_k U_k = \dot{m}_k + \dot{m}_{p \rightarrow k} \quad (3.43)$$

$$\dot{m}_{p \rightarrow k} = \sum_i \dot{m}_{p \rightarrow i, k} \quad (3.44)$$

Nesse sentido, na equação do balanço de fração mássica de espécies (3.41), a contribuição da conversão de massa em espécies é descrita em termos da fração mássica dos produtos da devolatilização (n_i):

$$\dot{m}_{p \rightarrow i, k} = n_i (\alpha_p \rho_p Y_{bio}) R_{dev} \quad (3.45)$$

A conversão da biomassa (consumível) em carvão e gases foram determinadas experimentalmente em função da composição do syngas obtido na Planta Piloto de Mauá-SP. Porém, nos testes de simulações realizadas e no estudo de caso apresentado no APÊNDICE I (Seção 6.1) adotou-se a devolatilização de madeira de pinho de acordo com as taxas de devolatilização adotadas (Tab. 3.7). Essas taxas são determinadas pela modelagem de primeira ordem de *Arrhenius*, na forma:

$$R_{dev} = -AT^\beta \left(-\frac{E}{R_u T_p} \right) \quad (3.46)$$

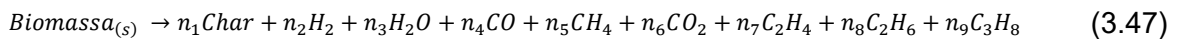
onde R_u é a constante universal dos gases e T_p a temperatura instantânea da partícula. De acordo com (QI et al., 2019), o fator de frequência é dado por $A = 5.0 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$, a energia de ativação por $E_a = 1.2 \times 10^8 \text{ J kmol}^{-1}$ e o expoente de temperatura $\beta = 0$.

Tabela 3.7 – Frações mássicas dos produtos de devolatilização de madeira (seca e sem cinzas) (QI et al., 2019)

Componente	Fração mássica (kg/kg)
H₂	0,106
CO	0,313
CO₂	0,146
CH₄	0,035
H₂O	0,200
Carbono Fixo	0,200

A Eq. (3.45) é utilizada para o cálculo dos termos de transferência de massa entre espécies da Eq. (3.41). No presente modelo, também não foi considerada a retração do diâmetro (*shrinkage*) das partículas de biomassa sendo consumida, que permanece constante ao longo do tempo. Assim, o consumo de biomassa é implementado numericamente pela redução da fração mássica dessas partículas de acordo com a taxa de devolatilização.

A reação química da Devolatilização completa, que consiste na liberação dos gases oriundos da biomassa, foi implementada no presente trabalho da seguinte forma:



De forma análoga, o modelo permite a implementação de termos fontes de energia, dado que a devolatilização é um processo exotérmico, havendo, pois, liberação de energia para a atmosfera interna do reator. Contudo, uma vez que a temperatura inicial do sistema foi configurada como uniforme em todo o domínio, o calor do processo de devolatilização foi desprezado.

3.8.3. Reações Heterogêneas e Homogêneas

Para as reações heterogêneas, a transferência de massa $\dot{m}_{p \rightarrow i,k}$ é dada em termos de fração mássica relacionados à estequiometria de cada reação, por meio dos coeficientes estequiométricos (n_i) de cada componente envolvido nas reações [3.1 a 3.4]:

$$\dot{m}_{p \rightarrow i,k} = n_i (\alpha_p \rho_p Y_{char}) R_{het} \quad (3.48)$$

onde Y_{char} representa a fração volumétrica da fase sólida de biomassa, que contém a espécie de carvão (*char*) e R_{het} representa a taxa da reação heterogênea, dada por:

$$R_{het} = \frac{R_{kin} R_{diff}}{R_{kin} + R_{diff}} P_i \quad (3.49)$$

e R_{diff} e R_{kin} representam a taxa de difusão e a taxa cinética, respectivamente, e P_i é a pressão parcial da i -ésima espécie química envolvida (ex.: H_2O , CO_2 , H_2 , etc.). As taxas de difusão e reação são expressas por:

$$R_{kin} = -AT^\beta \left(-\frac{E_a}{RT_p} \right) \quad (3.50)$$

onde E_a denota a energia de ativação, A é a constante pré-exponencial, β o expoente de temperatura (definido no presente como a unidade) – demonstrando a dependência linear da temperatura –, T_p representa a temperatura da partícula (biomassa) e R a constante do gás;

$$R_{diff} = \frac{C_i \left[\frac{T_p + T_g}{2} \right]^{0.75}}{d_p} \quad (3.51)$$

C_i se refere à constante de difusão de massa, T_p e T_g correspondem às temperaturas da partícula e do gás, respectivamente, e d_p representa o diâmetro da partícula, que é calculado pela fórmula:

$$d_p = \left(\frac{6m_p}{\pi\rho_p} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (3.52)$$

Os parâmetros das equações (3.17) e (3.18) são definidos experimentalmente para cada reação química, conforme a Tab. 3.8:

Tabela 3.8 – Constantes das reações químicas heterogêneas (KLIMANEK; BIGDA, 2018)

Reação	A [s/m]	E_a [J/kmol]	C [sK ^{-0.75}]
Reforming of Char	2.0×10^{-7}	7.9×10^7	5×10^{-12}
Boudouard	2.0×10^{-7}	7.9×10^7	5×10^{-12}
Methanation	1.18×10^{-5}	1.49×10^8	5×10^{-12}

Conforme explicado na Seção 3.4.7, as reações homogêneas implementadas no presente trabalho foram **water-gas shift**, **reverse water-gas shift**, **methane-steam reforming** e **Combustão de CO**, em sua forma simplificada da Tab. 3.4:

Computacionalmente, no software OpenFOAM, as reações homogêneas foram implementadas por meio dos pacotes prontos originalmente utilizados para modelagem de combustão laminar. Sua formulação foi implementada de forma análoga ao demonstrado nesta seção, com a diferença que, nas reações homogêneas, não há necessidade de transferência de massa entre fases. Nesse sentido, a Eq. (3.41) se dá de forma simplificada, conforme a seguir:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g Y_{i,g}) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g U_g Y_{i,g}) = \nabla (\alpha_g \rho_g D_{\text{eff}} \nabla Y_{i,g}) + \dot{m}_{i,g} \quad (3.53)$$

onde se tem o termo de transferência de massa entre espécies ($\dot{m}_{i,g}$), de subíndice i, g representando a i -ésima espécie da fase gasosa (g). Esse termo também foi calculado utilizando-se a taxa de reação de *Arrhenius* da mesma forma demonstrada anteriormente:

$$R_{\text{hom}} = AT^\beta e^{\left(-\frac{T_a}{T}\right)} \quad (3.54)$$

onde o expoente de temperatura (β) é nulo nesta formulação da taxa de reação das reações homogêneas (R_{hom}). E as constantes de cada reação dada conforme a Tab. 3.9:

Tabela 3.9 – Reações homogêneas e constantes de *Arrhenius* (GÓMEZ-BAREA; LECKNER, 2010; JONES; LINDSTEDT, 1988)

Reação	Forma Química	ΔH	A	T_a
Reação Water-gas shift	$CO_{(g)} + H_2O_{(g)} \rightleftharpoons CO_{2(g)} + H_{2(g)}$	- 41 kJ mol ⁻¹	2,78 x 10 ³	1,26 x 10 ⁷
Reverse Water-gas shift	$CO_{2(g)} + H_{2(g)} \rightleftharpoons CO_{(g)} + H_2O_{(g)}$	+ 41 kJ mol ⁻¹	9,59 x 10 ⁴	4,66 x 10 ⁷
Reação Methane-Steam Reforming	$CO_{(g)} + 3H_{2(g)} \rightleftharpoons CH_{4(g)} + H_2O_{(g)}$	- 206 kJ mol ⁻¹	3 x 10 ⁸	1,26 x 10 ⁸
Combustão (→) ou Redução (←)	$CO_{(g)} + \frac{1}{2}O_{2(g)} \rightleftharpoons CO_{2(g)}$	- 283 kJ mol ⁻¹	6,02 x 10 ⁸	1,51 x 10 ³

3.8.4. Gaseificação e Pirólise

Mediante a elaboração da modelagem termoquímica dos processos de Gaseificação e Pirólise apresentado na Fig. 3.19, que levou em consideração as metodologias numérico-computacionais aplicadas no software OpenFOAM, os subprocessos envolvidos foram implementados conforme modelagem descrita anteriormente e controlados a fim de se obter as mesmas condições operacionais do Reator da Planta Piloto de Mauá-SP.

Esse controle é feito por meio das condições de contorno aplicadas (ex.: vazão mássica de insuflamento, frações mássicas de espécies do ar, quantidade de material de leito inicial

etc.), taxas de reações e de transferência de massa/energia, estabelecer o correto balanço de massa dos experimentos realizado na planta.

Os fenômenos de pirólise e gaseificação foram contidos ou intensificados por meio do correto balanço das espécies gasosas (produzidas ou consumidas), sobretudo o oxigênio (O_2), uma vez que a pirólise se difere fortemente da gaseificação no quesito do produto resultante. Essa produz essencialmente gases oriundos das reações de redução, enquanto aquela é responsável pela degradação térmica da biomassa em atmosfera escassa em oxigênio. A composição final do gás de síntese obtida pelas simulações em comparação com o syngas produzido experimentalmente é, então, avaliada como uma das formas de se certificar a respeito da metodologia implementada na modelagem.

A seguir é apresentado o modelo físico geral do reator de escala semi-industrial estudado no presente trabalho.

3.9. Metodologia de Desenvolvimento e Validação do Modelo

A metodologia de desenvolvimento e validação do modelo consistem, de forma resumida, nas seguintes etapas:

- 1) Montagem do **diretório de arquivos do OpenFOAM** com os modelos teóricos-computacionais, condições iniciais, condições de contorno, informações do modelo, propriedades termodinâmicas, métodos numéricos, atributos físicos e químicos;
- 2) **Pré-processamento:** Definição das condições de contorno, coeficientes de submodelos, fator de relaxação numérica, tempo de simulação, passos de tempo (físico, químico), tolerâncias numéricas, variáveis de interesse de pós-processamento para gravação etc.
- 3) Na etapa de inserção de **condições contorno**, implementar a composição da biomassa, em termos da fração mássica de carbono fixo, voláteis, cinzas e umidade, oriunda da Análise Imediata do **CDRSU**;
- 4) Ajustar as **condições iniciais** e velocidade de entrada do ar (ou vazão) para atingir o regime de fluidização desejado estável, atingindo também a **pressão de entrada do agente gaseificante** (dado experimental) aproximadamente constante;
- 5) Avaliar **convergência de malha** para as variáveis da fluidização;

- 6) Implementar o processo de **Devolatilização** utilizando-se das taxas de reação de CRDSU (ou CDR) de trabalhos semelhantes da literatura e rodar o caso até a homogeneização do sistema e estabilização das variáveis:
 - a) Pressão de entrada do ar pelo *inlet*;
 - b) Temperatura do sistema ($T_{areia} \cong T_{air} \cong T_{partículas}$);
 - c) Composição do *syngas* que flui pela saída do domínio.
- 7) Obter as informações de todas as variáveis no domínio do instante de tempo já estabilizado e realizar o **balanço de massa**:
 - a) Ajustar a proporção de gás produzido por essa reação em relação ao consumido para que a massa de gás produzida seja igual a massa sólida de biomassa consumida;
- 8) Implementar cada **reação química** (heterogêneas e homogêneas) de forma independente das demais e rodar o caso até a homogeneização do sistema e estabilização das variáveis:
 - a. Pressão de entrada do ar pelo *inlet*;
 - b. Temperatura do sistema ($T_{areia} \cong T_{air} \cong T_{partículas}$);
 - c. Composição do *syngas* que flui pela saída do domínio.
- 9) Realizar o **balanço de massa**, conforme o passo (7).
- 10) Verificar a **convergência de malha** para as variáveis termoquímicas, incluindo todas as reações de interesse, e definir malha de menor custo computacional;
- 11) Definir em qual tempo (**tempo de estabilização**) obtém-se o caso plenamente estabilizado, i.e., em termos da fluidodinâmica e da termoquímica;
- 12) Implementar a **injeção de biomassa** pelo *inlet* conforme o balanço operacional experimental da Planta Piloto de Mauá-SP (Fig. 3.7);
- 13) Rodar durante o tempo de estabilização para obtenção do estado de **Regime Contínuo** da operação do reator;
- 14) Comparação da **composição geral do syngas** com os dados experimentais realizados na Planta Piloto de Mauá-SP;
- 15) Alterar iterativamente as **taxas de reações** dos processos químicos até que se obtenha erro menor que 1% em cada espécie química na comparação da composição do syngas em *outlet*.
- 16) Verificar o balanço de massa das espécies químicas para inferir sobre a **coerência do modelo**.

O modelo obtido pode ser validado ao se inserir outros tipos de biomassa oriundas de cigarro, pneu ou madeira; conforme já testadas na Planta Piloto de Mauá-SP, a fim de se obter a composição do *syngas* conforme os dados experimentais. Não foram realizadas essas análises devido à carência de dados experimentais oriundos da Planta Piloto de Mauá-SP. Os dados obtidos quando da gaseificação de biomassa de cigarros não puderam ser utilizados no presente trabalho devido ao baixo PCI do gás obtido causado por mal condicionamento de amostras (MBIÉ et al., 2023).

A presente metodologia também foi validada com a reprodução de outros dados experimentais, utilizando-se outras geometrias de reatores da literatura, em que se obteve também boa coerência nos resultados.

A expectativa é que o modelo possa ser utilizado para prever o comportamento do reator e a composição química do *syngas* obtida com a modificação de técnicas de operação, como a injeção de vapor ou de outras reações químicas para eliminação de substâncias nocivas ao meio ambiente.

3.10. Modelo Físico Geral

Na Seção 3.1 foi apresentado algumas características da Planta Piloto de Mauá-SP, suas dimensões, geometria e o balanço de massa de sua operação em regime contínuo (Fig. 3.7). Assim, compilou-se as informações necessárias para a implementação no modelo computacional de acordo com o software Openfoam, em que foram utilizadas nas simulações ao longo do trabalho duas geometrias (Fig. 3.20), uma geral e uma simetrizada a fim de se reduzir o custo computacional em determinadas situações.

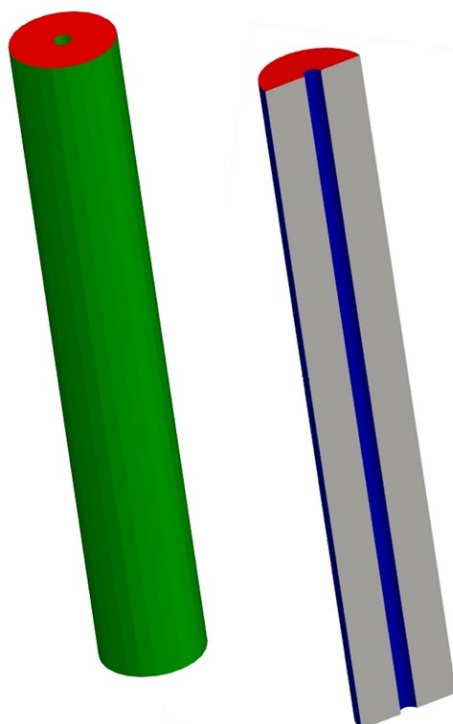


Figura 3.20 – Representação da geometria geral e simétrica utilizada na maioria das simulações. Indicações das superfícies de controle: *outlet* (vermelho) e *walls* (azul e verde)

Assim, as definições teóricas do modelo foram reunidas na Tab. 3.10, as justificativas da seleção de cada modelo foram apresentadas ao longo deste capítulo, os dados experimentais da Planta Piloto de Mauá-SP apresentados na Tab. 3.11 e as informações de propriedades termodinâmicas e parâmetros numéricos na Tab. 3.12.

Tabela 3.10 – Tabela resumo dos parâmetros de modelo para simulação CFD

Parâmetro	Descrição
Modelo de Escoamento Multifásico	Euler-Euler
Parâmetros de fração volumétrica	Implícito
Formulação Transiente	Euler
Número de Fases Eulerianas	03 (gás, biomassa, areia)
Fases	Ar e/ou Vapor (fase contínua)
	Biomassa (fase dispersa)
	Areia (fase dispersa)
Componentes/Espécies consideradas	Biomassa: fase multicomponente contendo <i>biomassa</i> (consumível), carvão (<i>char</i>), cinzas (<i>ash</i>)

	Areia: fase monocomponente
	Gás: fase multicomponente contendo as espécies químicas H_2O , CO_2 , CO , H_2 , O_2 , CH_4 , N_2 , C_2H_4 , C_2H_6 , C_3H_8
Modelo de Transferência entre fases	Correlações empíricas de <i>Ranz-Marshall</i> (RANZ; MARSHALL, 1952)
Modelo de Arrasto	<i>Gidaspow</i> (GIDASPOW, 1994b)
Propriedades termofísicas	<i>Sutherland's Law</i> (SUTHERLAND, 1893)
	Tabelas Termodinâmicas JANAF (CHASE, 1998)
Filtro de turbulência	<i>Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS)</i>
Modelos de Viscosidade	Gases: Modelo Newtoniano
	Sólidos: Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares (KTGF) (VAN WACHEM, 2000)
Fechamento de turbulência	$k - \varepsilon$

Tabela 3.11 – Parâmetros da operação contínua do Reator da Planta Piloto de Mauá-SP

Parâmetro	Descrição / Valor
Geometria (Fig. 3.10 e Tab. 3.10)	Altura = 9,5 m
	Diâmetro = 1,46 m
	Área de <i>inlet/outlet</i> = 1,63 m
	Diâmetro Tudo <i>Downdraft</i> = 0,25 m
Pressão de insuflamento	130 kPa
Umidade do CDRSU	15 wt% (INFUESTA et al., 2019b)
Dimensão média do CDRSU	25 mm (INFUESTA et al., 2019b)
Temperatura de Operação Contínua	850 °C
Temperatura de entrada da biomassa	30 °C
Temperatura de entrada do ar	400 °C
Vazão mássica de injeção de biomassa	296 kg h ⁻¹ (0,0822 kg s ⁻¹)
Vazão mássica de insuflamento de ar	488,4 kg h ⁻¹ (0,1357 kg s ⁻¹)
Vazão mássica de extração de cinzas	79,96 kg h ⁻¹ (0,0222 kg s ⁻¹)

Tabela 3.12 – Propriedades termodinâmicas e parâmetros numéricos para simulação CFD

Parâmetro	Descrição / Valor
Massa específica da biomassa	250 kg m ⁻³ (INFUESTA et al., 2019b)
Massa específica da areia	2500 kg m ⁻³
Massa específica das cinzas	2080 kg m ⁻³ (LOPES SILVA; CELINA LANGE, 2008)
Propriedades termodinâmicas do ar	Tabelas JANAF (CHASE, 1971)
Vazão mássica de insuflamento de ar	0,1357 kg s ⁻¹ @ 400 °C
Umidade da biomassa considerada	0 wt%
Diâmetro da biomassa	20 × 10 ⁻³ m
Diâmetro da areia	1,5 × 10 ⁻³ m
<i>Solver</i>	<i>multiphaseEulerFoam</i>
Solução numérica	PIMPLE
Malha Definitiva conforme teste de independência de malha	3D
	Volumes finitos hexaédricos
	Número de Células = 112.000
Agente gaseificante	Ar e/ou Vapor
Velocidade (superficial) do ar	1,5 m s ⁻¹
Pressão de insuflamento*	130 kPa
Massa de areia do leito	2640,73 kg, calculado por Eq. (3.37)
Temperatura inicial do reator	850 °C
Temperatura de injeção da biomassa	30 °C
Temperatura de insuflamento do ar	400 °C
Condições de contorno em paredes	Isolada Termicamente, sem escorregamento fluidodinâmico
Passo de tempo	1 × 10 ⁻⁴ s
Tempo de simulação (obtenção do caso parcialmente estabilizado)	300 s
Tempo estabilidade fluidodinâmica (obtido)	5 s
Tempo estabilidade termoquímica (obtido)	10 s

* Obtida de forma regressiva pela quantidade de material de leito inicial, conforme detalhado na Seção 3.6.1.

As condições de contorno definidas para o modelo desenvolvido no presente trabalho foram resumidas na Tab. 6.2, do APÊNDICE II.

Configurações de processamento da máquina em que foram realizadas a maioria das simulações:

Dell Vostro 3710

12th Gen Intel® Core™ i7-12700 x 20

Memória 15,3 GB

3.11. Indicadores de Performance de Gaseificação

Diversos indicadores são propostos para avaliar e quantificar o desempenho de tecnologias de recuperação energética que envolvem transformações termoquímicas (MANU; KAILAS; MADAV, 2023).

A primeira avaliação diz respeito ao Poder Calorífico Inferior (PCI ou, do inglês, *Lower Heating Value – LHV*), que possibilita inferir sobre a combustão de gases e da própria biomassa. Apesar de não ser o objetivo a combustão da biomassa, sua determinação é útil para critérios comparativos com o PCI do gás.

O PCI do CDRSU e do syngas foram determinados, respectivamente, por meio de experimentos utilizando-se equipamento de análise termogravimétrica (TGA) e análise por empresa especializada. No presente trabalho, o PCI do gás de síntese obtido por simulação foi calculado considerando-se sua composição. O memorial desse cálculo pode ser encontrado no trabalho de (MONTEIRO, 2019), resumido pela seguinte equação:

$$PCI_{syngas} = LHV_{syngas} = \frac{|Q|}{\sum_i n_i MM_i} \quad (3.55)$$

onde $|Q|$ é o módulo da energia térmica liberada quando da combustão dos gases, n_i o coeficiente estequiométrico da reação de combustão da espécie química i e MM_i a massa molar da espécie i .

A finalidade dessa avaliação é calcular a razão entre esses parâmetros, que indicaria o percentual de energia obtida no gás de síntese produzido em relação (R_{LHV}) a energia quando da combustão direta do CDRSU, por meio da equação seguinte:

$$R_{LHV} = \frac{LHV_{syngas}}{LHV_{CDRSU}} \times 100 \quad (3.56)$$

Eficiência de Conversão de Carbono (*CCE – Carbon Conversion Efficiency*) é um parâmetro de análise de desempenho que consiste na conversão de carbono inicialmente presente na biomassa em produtos gasosos, i.e., espécies químicas, oriundos do carbono. Esse parâmetro é calculado por (ASKARIPOUR, 2020):

$$CCE(\%) = \frac{\dot{m}_{syngas} \times Y_{syngas} \times (\alpha_{CH_4} + \alpha_{CO} + \alpha_{CO_2} + \alpha_{C_2H_4} + \alpha_{C_2H_6} + \alpha_{C_3H_8}) \times 12/22,4}{\dot{m}_{biomassa} \times \%C_{biomassa}} \times 100 \quad (3.57)$$

onde %C é a porcentagem de carbono fixo da biomassa (Tab. 3.5).

O parâmetro mais importante da gaseificação é a Eficiência de Gaseificação (*CGE – Cold Gas Efficiency*), que quantifica a energia reaproveitada da biomassa considerando todo seu potencial calorífico, pode ser calculado por (LAMAS et al., 2023):

$$CGE(\%) = \frac{\dot{m}_{syngas} LHV_{syngas}}{\dot{m}_{biomassa} LHV_{biomassa}} \times 100 \quad (3.58)$$

Frequentemente em processos exclusivamente de combustão, utiliza-se do parâmetro Razão de Ar/Combustível (*RAC*) para determinar o ponto de combustão de determinado comubustível. Esse parâmetro, calculado pela Eq. (3.59), indica se se trata de uma combustão dita “pobre” (em escassez de oxigênio), “rica” (abundância de oxigênio) ou estequiométrica (condição ideal em eficiência).

$$RAC = \frac{\dot{m}_{ar}}{\dot{m}_{CDRSU}} \quad (3.59)$$

Em se tratando de processos termoquímicos como a gaseificação, esse parâmetro é atrelado às informações do processo determinando a Razão de Equivalência/Eficiência (*EF*, do inglês, *Efficiency Ratio* ou *Equivalence Ratio*), que demonstra a quantidade de oxigênio utilizada no processamento autotérmico com relação à quantidade estequiométrica de combustão da biomassa CDRSU, i.e., a vazão de oxigênio necessária para a combustão completa (ideal) desse combustível. No presente trabalho, esse parâmetro foi calculado para demonstrar, sobretudo, a diferença da gaseificação para a combustão de biomassa, que ainda é assunto de discussão no âmbito da sustentabilidade. São calculados por meio das seguintes equações:

$$ER = \frac{RAC_{real}}{RAC_{estequiométrica}} \quad (3.60)$$

Esses parâmetros são frequentemente utilizados para comparativo entre reatores, processos e tecnologias e serão discutidos no Capítulo IV.

3.12. Análise Geral do Reator da Planta Piloto de Mauá-SP

Essa seção será apresentada posteriormente da apresentação dos resultados obtidos e terá a finalidade de inferir sobre os resultados obtidos apresentando aspectos de seu escoamento interno real, informações da termoquímica ao longo da operação, possíveis dificuldades e oportunidades de melhorias tecnológicas baseado nos resultados obtidos do funcionamento do reator em sua operação transiente e contínua. Ademais, buscou-se também apresentar situações ainda não testadas no referido reator como:

- i) **Análise paramétrica:** modificações de parâmetros de simulação a fim de obter gás de síntese com composições tais de maior Poder Calorífico Inferior;
- ii) **Implementação da utilização de misturas com vapor** como agente gaseificante e sua influência na composição do gás de síntese produzido;

Tais perspectivas observadas quando do escoamento do reator da Planta Piloto de Mauá-SP.

CAPÍTULO IV

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para apreciação do leitor, a linha de pesquisa do presente trabalho já contempla algumas publicações em revistas com *Qualis*, relacionadas à gaseificação de derivado Resíduos Sólidos Urbanos (RSU), em que houve participação do presente discente. A saber:

- ***Design of an industrial solid waste processing line to produce refuse-derived fuel*** (INFUESTA et al., 2019b);
- ***A Gas Chromatography Method for Simultaneous Quantification of Inorganic Gases and Light Hydrocarbons Generated in Thermochemical Processes*** (SILVA et al., 2021);
- ***Gasification of municipal refuse-derived fuel as an alternative to waste disposal: Process efficiency and thermochemical analysis*** (FERREIRA et al., 2021a);
- ***Eulerian computational fluidisation modelling using OpenFOAM applied to a semi-industrial fluidised bed reactor and pilot plant application*** (MONTEIRO et al., 2023).

Além de tais contribuições na linha de pesquisa, também citadas ao longo do trabalho. Em se tratando especificamente da simulação do reator de escala semi-industrial da Planta Piloto de Mauá-SP, objeto de estudo do presente trabalho, adiante serão apresentados os principais resultados obtidos e as discussões pertinentes.

4.1. Validação do Modelo

4.1.1. Validação da metodologia numérico-computacional

Conforme descrito na seção 4.1.1, compondo a validação do modelo, trabalhos da literatura acadêmica foram de grande importância ao longo do desenvolvimento do modelo, uma vez que foram utilizados para validar a metodologia computacional, modelos físico-químicos e métodos computacionais utilizados para representar o reator termoquímico de gaseificação de resíduos em larga escala por meio da abordagem EU-EU. Nesta etapa, alguns trabalhos foram selecionados, reproduzidos no OpenFOAM e avaliados os resultados e informações produzidas pelas simulações.

O trabalho de Qi et al. (2019) envolve a (i) avaliação de dois modelos de transferência de calor por meio de uma geometria simplificada de tamanho reduzido e (ii) a gaseificação a vapor de biomassa em leito fluidizado borbulhante com um reator de altura de leito (*freeboard*) de 1,5 m. Ambos os casos com validação experimental, útil para reprodução no software OpenFOAM e validação da metodologia computacional presente.

As simulações realizadas por Ku; Li; Løvås (2015) consistem também na gaseificação a vapor de biomassa em reator com geometria semelhante ao anterior e validação experimental.

4.1.1.1. Reprodução do trabalho de Ku; Li; Løvås (2015)

Os autores apresentaram em seus resultados as imagens da simulação quando do início do escoamento e insuflamento do agente gaseificante (Fig. 4.2) e ao fim da simulação (Fig. 4.4), além de demonstrarem a oscilação de pressão de entrada do ar na superfície de controle *inlet* (Fig. 4.6).

Na comparação de resultados obtidos por simulações realizada sob abordagem Euleriana-Euleriana (EU-EU) e Euleriana-Lagrangeana (EU-LA) há clara distinção na quantidade de detalhes do escoamento multifásico. A abordagem EU-LA, utilizada no trabalho de Ku; Li; Løvås (2015), produz resultados visuais das partículas em maior qualidade no sentido de movimentação de partículas, o que não é observado na abordagem EU-EU, utilizada no presente trabalho. Tal visualização ainda é influenciada pela interpolação da fração mássica entre as células da malha utilizada. Portanto, mesmo com uma malha extremamente refinada, no sentido de aumentar a qualidade dos detalhes visuais, o escoamento das partículas sólidas apresentar-se-ia destoante entre os resultados visuais

obtidos nas simulações, conforme apresenta-se a comparação pelas figuras subsequentes (Fig. 4.1 a 4.4).

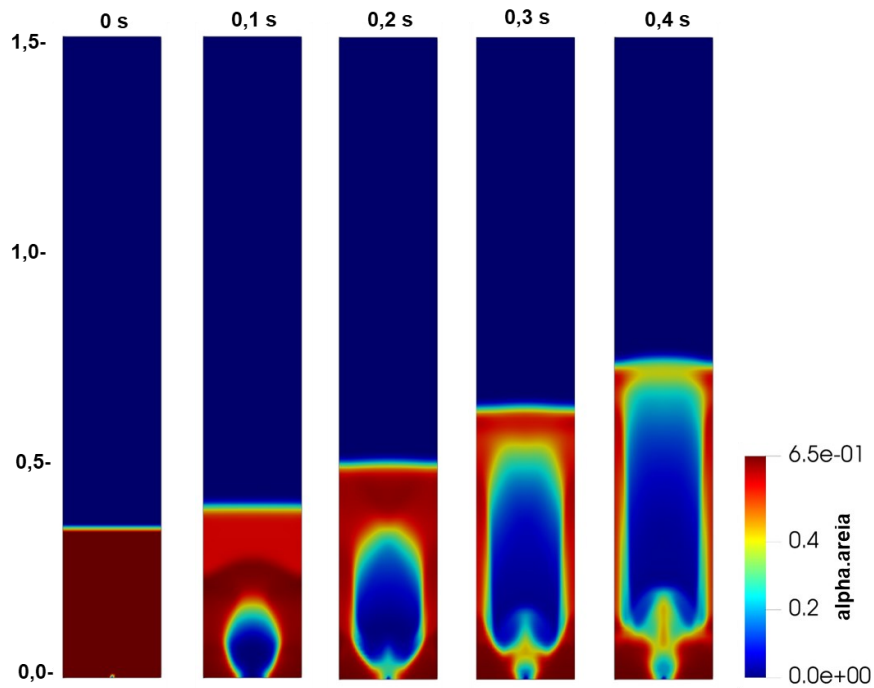


Figura 4.1 – Fração mássica da fase areia (*alpha.areia*) no início da simulação

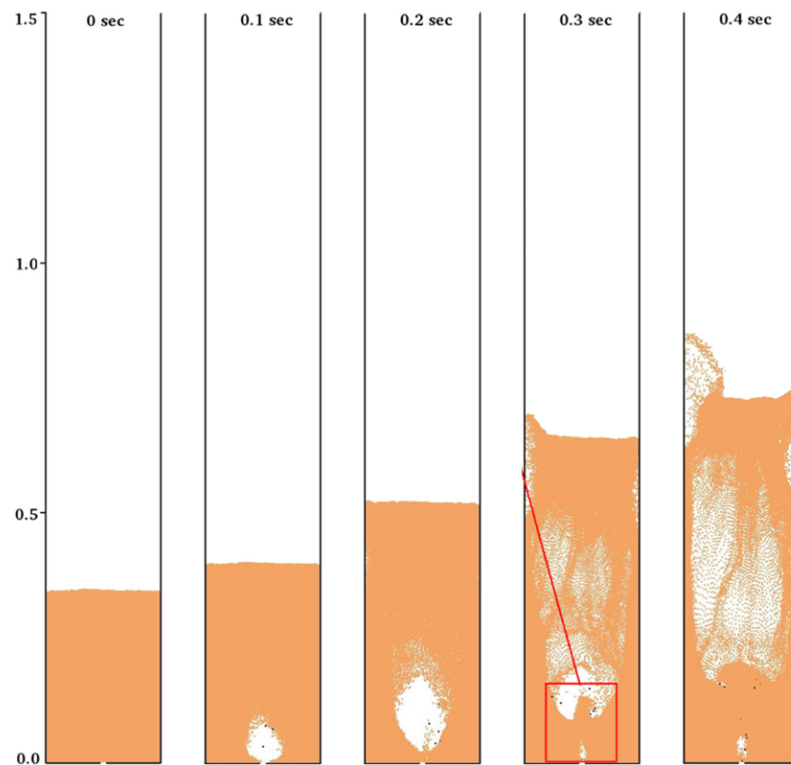


Figura 4.2 – Aspecto do escoamento evidenciando a movimentação da areia nos instantes iniciais da simulação. Adaptado de Ku; Li; Løvås (2015)

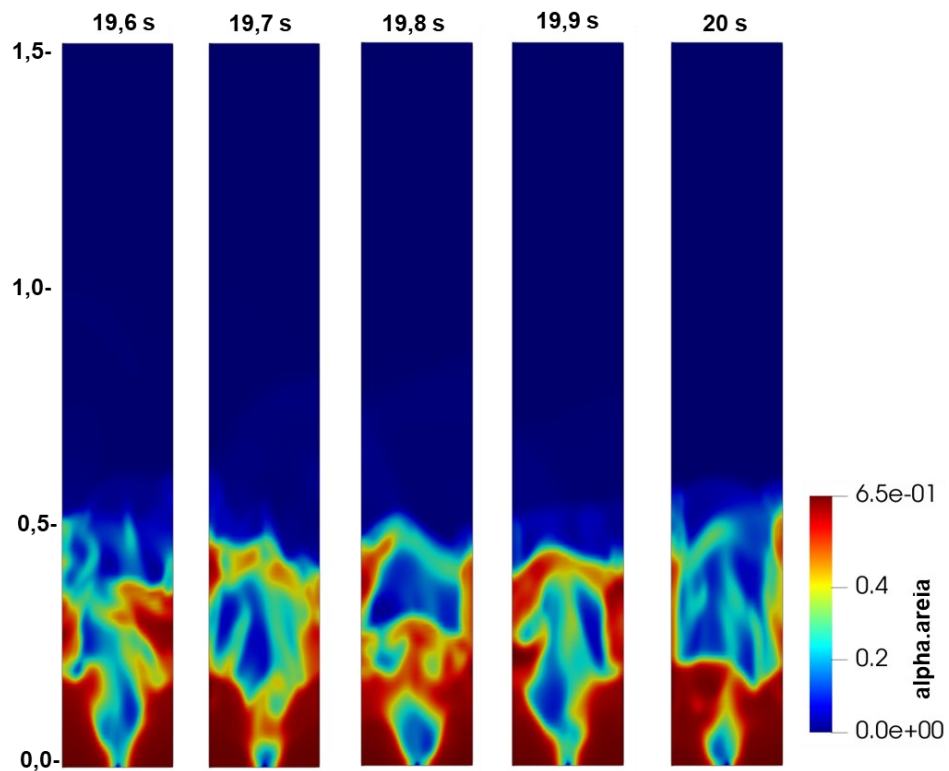


Figura 4.3 – Fração mássica da areia (*alpha.areia*) nos instantes finais da simulação

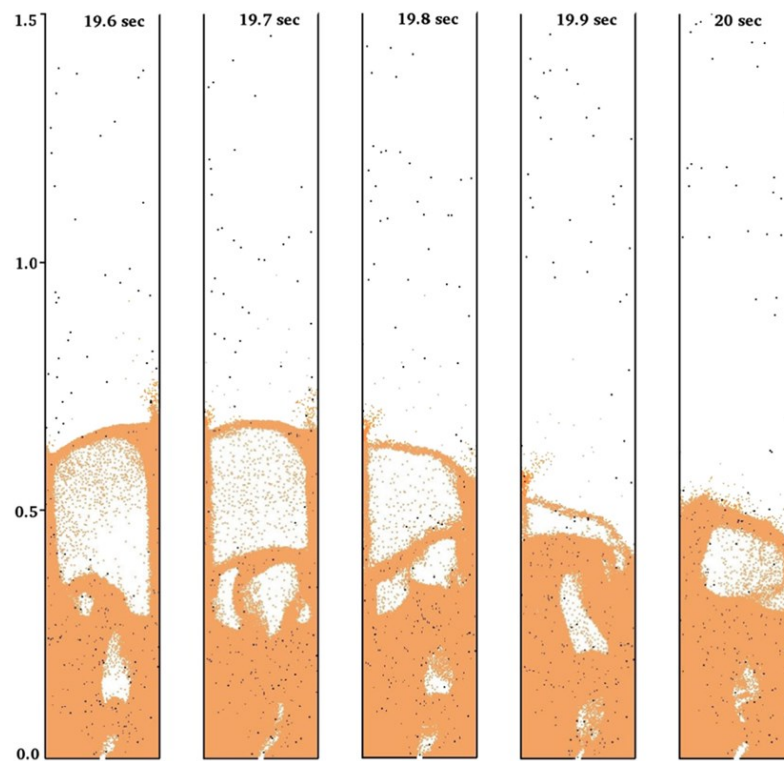


Figura 4.4 - Aspecto do escoamento evidenciando a movimentação da areia nos instantes finais da simulação. Adaptado de Ku; Li; Løvås (2015)

Por outro lado, a comparação dos parâmetros obtidos é válida para caracterizar o escoamento: quando se analisa a altura do leito na condição estável do reator, constata-se a obtenção da mesma altura máxima do escoamento inicial e mesma altura final do leito em escoamento (Fig. 4.3 e 4.4). Nas Fig. 4.5 e 4.6 ainda se percebe grande coerência entre os resultados obtidos na amplitude de oscilação da pressão de insuflamento de ar. Tais observações compõem a quantificação dos parâmetros de interesse para a adequada caracterização da fluidização de um reator de leito fluidizado.

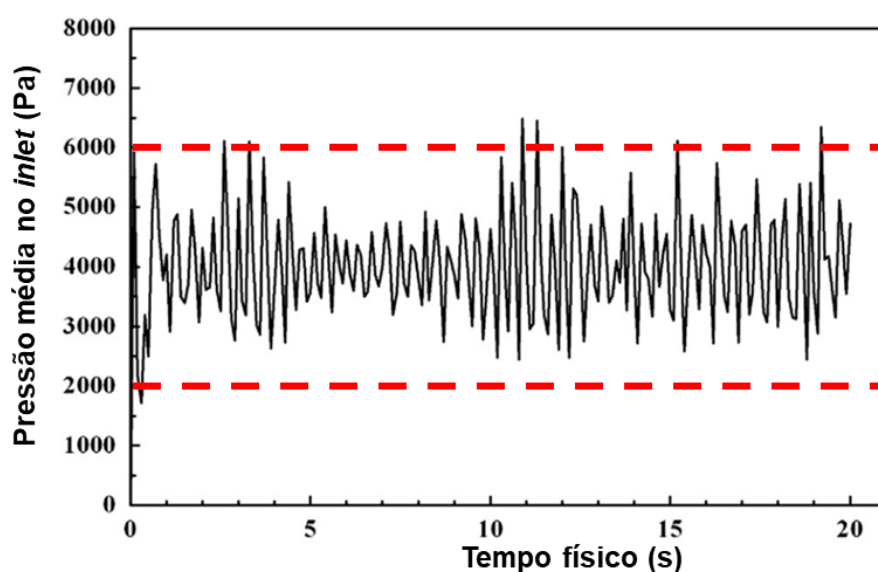


Figura 4.5 – Pressão na superfície *inlet* de entrada ao longo do tempo físico. $T = 820\text{ }^{\circ}\text{C}$, $S/B = 1,2$. Adaptado de Ku; Li; Løvås (2015)

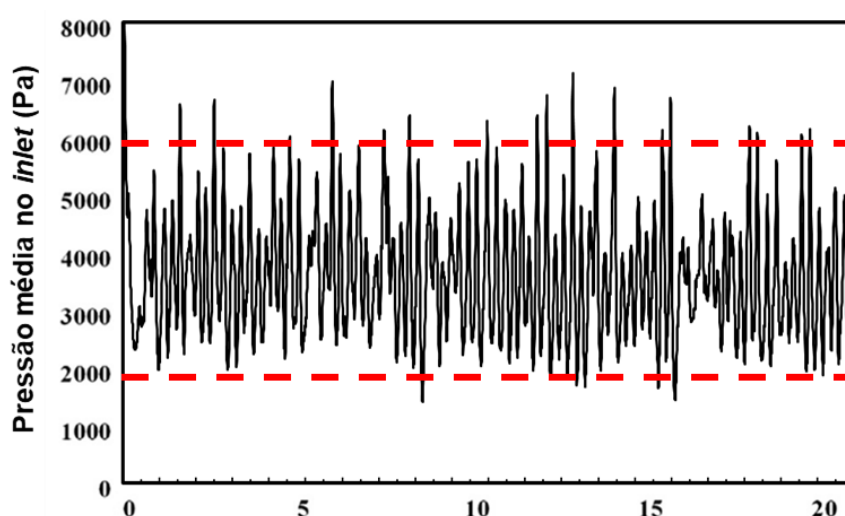


Figura 4.6 – Pressão na superfície *inlet* de entrada ao longo do tempo físico nas mesmas condições que o trabalho reproduzido dos autores

A fluidodinâmica do regime borbulhante obtida nas simulações de reatores é frequentemente avaliada em termos da pressão de insuflamento do agente gaseificante na superfície *inlet* de entrada no reator. Conforme demonstrado na Fig. 4.5, resultado das simulações de Ku; Li; Løvås (2015), em comparação com o mesmo parâmetro obtido pelas simulações do presente trabalho (Fig. 4.6), observa-se a concordância da pressão obtida e a amplitude dessa oscilação.

Trata-se de um parâmetro que indica o tipo de regime de fluidização, podendo-se, inclusive, inferir sobre a intensidade da formação e tamanho de bolsões de ar e bolhas no leito fluidizado. Dessa forma, o parâmetro pode ser avaliado para comparação de reatores de geometrias em diferentes tamanhos, demonstrando-se bastante útil no estudo de escala em reatores. Portanto, sua avaliação foi utilizada para o *scale-up* do presente modelo e obtenção do mesmo regime de escoamento para o modelo do Reator da Planta Piloto de Mauá-SP.

Por fim, avaliou-se a composição do gás de síntese obtida por simulações no trabalho de Ku; Li; Løvås (2015), apresentada na Fig. 4.8, em comparação com os resultados da termoquímica obtida por meio da modelagem utilizada no presente trabalho (Fig. 4.9). Os resultados também foram consistentes em termos qualitativos e quantitativos. Pequena variação foi observada ao fim do tempo físico simulado na fração volumétrica de cada espécie química implementada. A Fig. 4.9 resume as informações obtidas por simulações e experimentalmente (SONG et al., 2012).

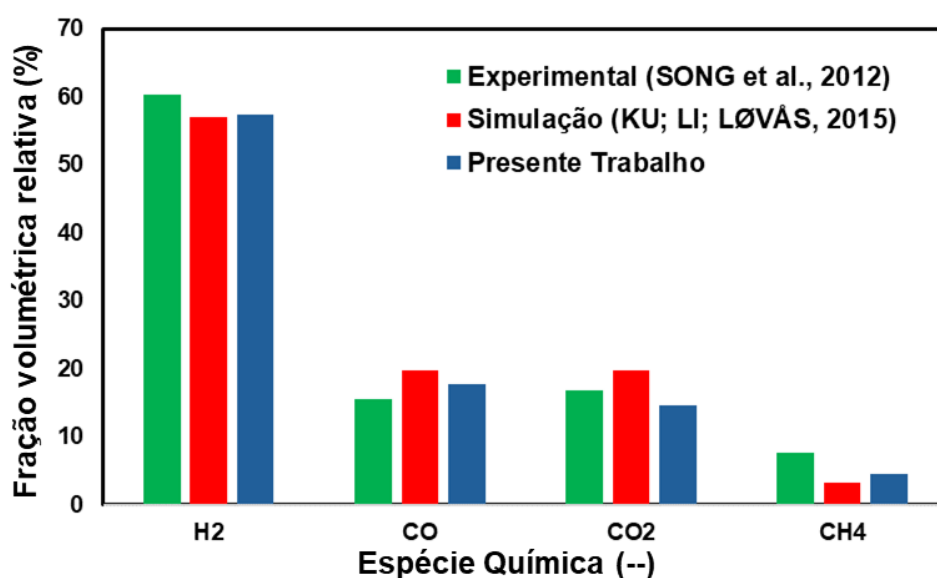


Figura 4.7 – Comparativo das composições obtidas com relação à resultados de simulação e experimental. Fonte: (KU; LI; LØVÅS, 2015; SONG et al., 2012)

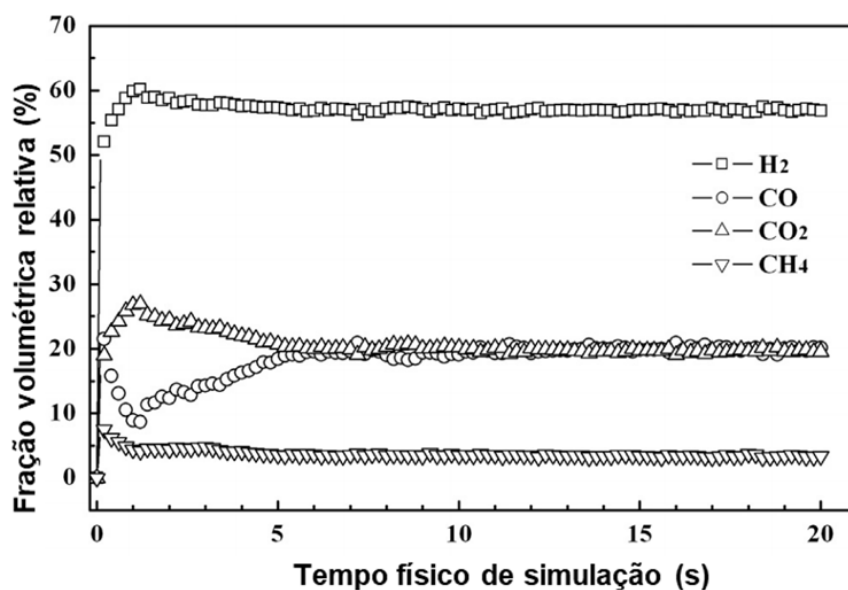


Figura 4.8 – Composição do gás obtida por simulação avaliada na saída do reator. Adaptado de Ku; Li; Løvås (2015)

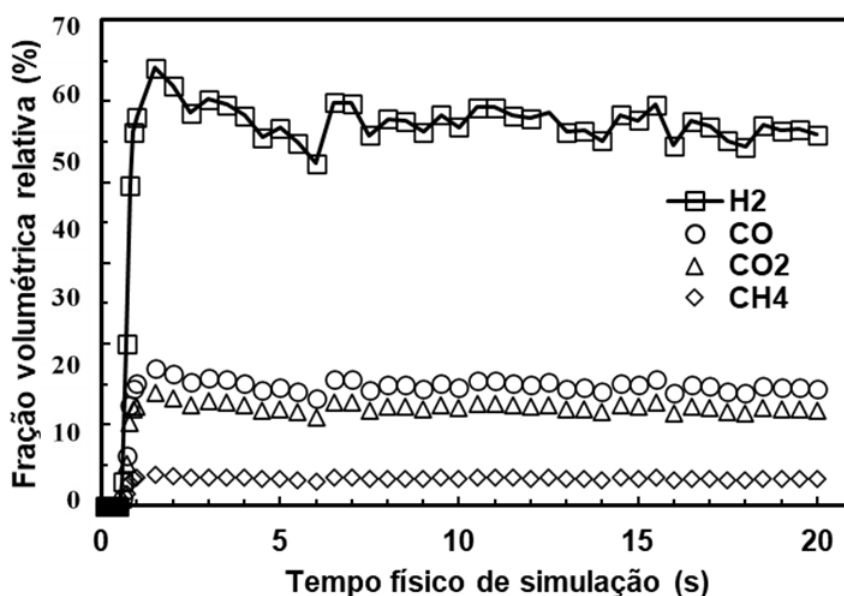


Figura 4.9 – Composição do gás obtida por simulação na modelagem do presente trabalho em reprodução ao trabalho de Ku; Li; Løvås (2015)

Tais comparações tiveram o objetivo de validar a metodologia numérico-computacional utilizada e implementada no software OpenFOAM. A abordagem EU-EU foi avaliada em comparação com trabalhos que utilizaram, inclusive, abordagem diferente, como a EU-LA. Contudo, tais resultados permitem validar o modelo utilizado, que é capaz de produzir resultados consistentes com dados de simulação e experimentais presentes na literatura acadêmica.

4.1.1.2. Reprodução da primeira parte do trabalho de Qi et al. (2019)

Na primeira parte de seu trabalho conduzido sob abordagem EU-LA, (Qi et al., 2019) consideraram importante avaliar primeiramente os efeitos na transferência de calor de duas formas diferentes de se considerar o material particulado. Nesse sentido, utilizaram o Método de Elemento Discreto (do inglês, *Discrete Element Method – DEM*), que considera cada partícula de forma individual (elemento lagrangeano), e o Método Granular Grosseiro (*Coarse Grain Method – CGM*), que modela o particulado sólido como grupos de partículas (ou pacotes).

Esse trabalho foi reproduzido pela presente modelagem sob abordagem EU-EU, justamente para avaliar a capacidade dos modelos implementados, inclusive, em se tratando da transferência de calor.

Os autores avaliaram a mudança de temperatura das partículas, com validação experimental, ao longo do tempo físico simulado, de 20 s. Para os mesmos parâmetros considerados, a evolução da temperatura, apresentada na Fig. 4.10, teve boa consistência com os resultados experimentais. Demonstrou-se, portanto, que os métodos ambos os métodos sob abordagem lagrangeana dos autores são capazes de representar o fenômeno da transferência de energia térmica envolvidos no reator. De maneira concorde, a modelagem do presente trabalho, desenvolvido em abordagem distinta, também demonstrou boa coerência com as simulações e com os dados experimentais comparados.

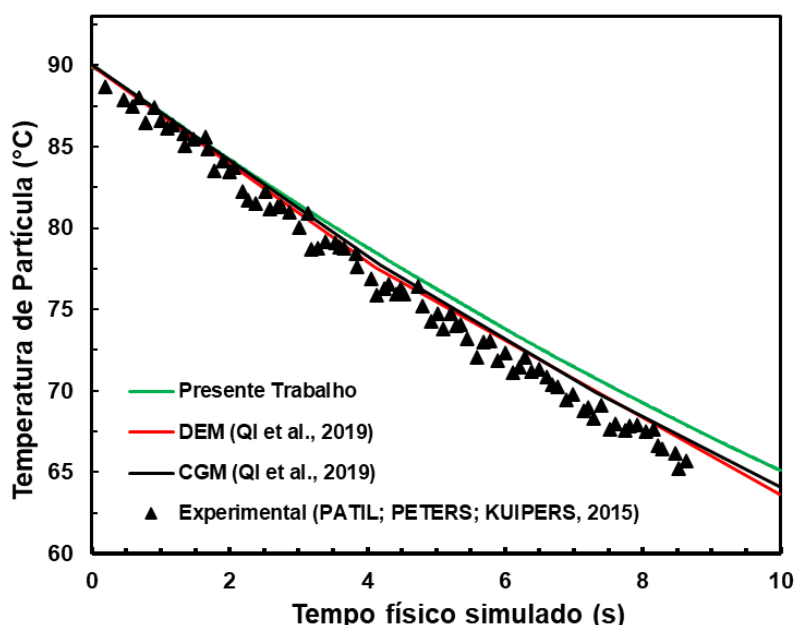


Figura 4.10 – Comparativo da temperatura média de partículas ao longo da simulação. Fonte de dados: (PATIL; PETERS; KUIPERS, 2015; Qi et al., 2019)

Utilizando-se dos mesmos tipos de modelagem, também foi feita a análise comparativa da oscilação do leito fluidizado, assumindo o regime borbulhante e analisada a amplitude do parâmetro de pressão a fim de se caracterizar o escoamento. Esses resultados demonstrados na Fig. 4.11, indicam, conforme o esperado, o grau de detalhamento resultante da simulação com o Método de Elemento Discreto (*DEM*), que, por considerar partículas individualmente, permite a maior oscilação, formação de vazios e borbulhamento do leito em escoamento. O Método Granular Grosseiro (*CGM*), apresentou comportamento intermediário (em menor amplitude), quando em comparação com o resultado da simulação sob abordagem Euleriana (*EU-EU*) utilizada no presente modelo. Nesse sentido, a abordagem *EU-EU* permite boa comparação entre simulações, com menor custo computacional, porém, com menor nível de detalhamento do escoamento interno ao reator.

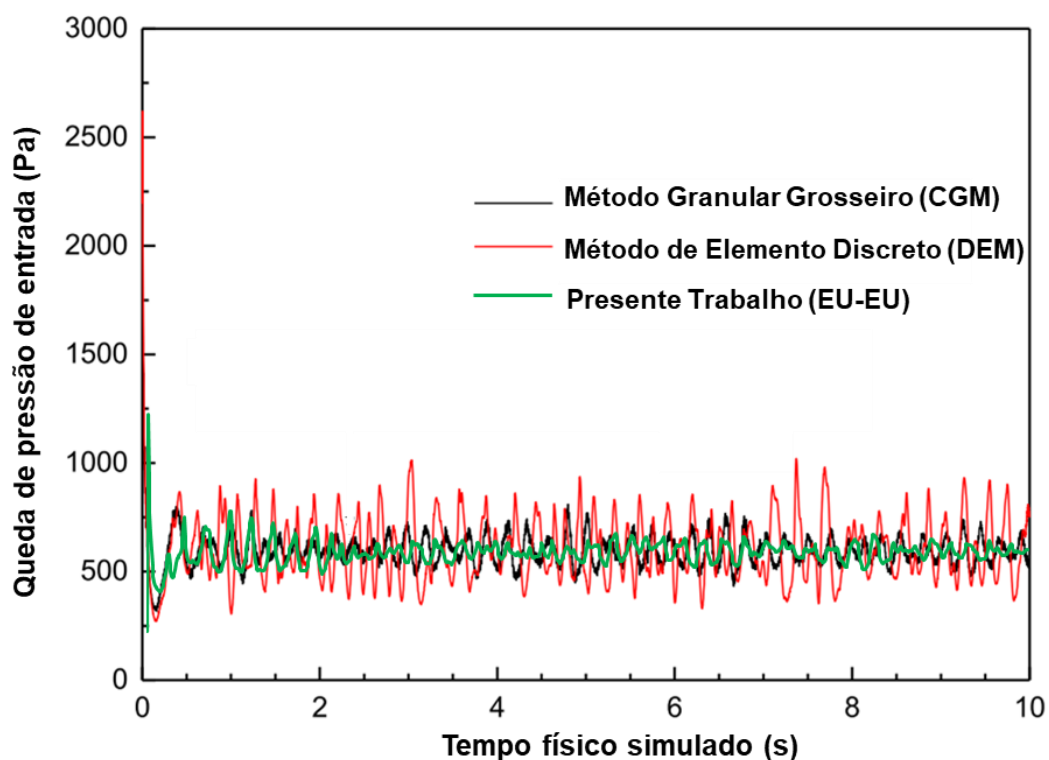


Figura 4.11 – Comparativo da oscilação da pressão de entrada no reator dentre diferentes métodos lagrangeanos (QI et al., 2019) e da simulação do presente trabalho com metodologia euleriana na fluidização do particulado sólido

4.1.2. Validação Fluidodinâmica

4.1.2.1. Scaling-up

Conforme descrito na Seção 3.3, uma das etapas de validação do sistema teórico implementado é o estudo de **scaling-up** de reatores. Nesse sentido, os modelos de arrasto comumente utilizados para as simulações CFD relacionadas foram avaliados nesse estudo, referindo-se apenas à mudança de escala de reatores.

Existem fatores-chave que regem esta transição e cuja previsão ainda não é bem conhecida. Ao mudar de um reator pequeno para um reator maior (processo de *scaling-up*), a hidrodinâmica muda significativamente, o que significa que as partículas do substrato se comportam de maneira diferente. Além disso, o tempo de residência é diferente causando grande influência nas reações químicas. Ambas as contribuições levam a composições finais de gás de síntese que podem diferir substancialmente, pelo menos, no seu valor absoluto. Por esta razão, é necessário recolher dados de reatores com dimensões semelhantes para evitar erros e reduzir riscos e incertezas de alto nível (COUTO et al., 2016).

Portanto, faz-se necessária a avaliação das relações dos parâmetros envolvidos na fluidização quando se utiliza os modelos já bem consolidados para escoamentos de pequena escala em modelagem de larga escala. A avaliação consistiu no comparativo das relações fluidodinâmicas de um trabalho experimental selecionado da literatura acadêmica com fluidodinâmica semelhante.

No presente estudo, os parâmetros utilizados foram definidos conforme o trabalho de Shao et al. (2019), por apresentar maior semelhança com relação a outros reatores. Sendo todos os parâmetros da mesma ordem de grandeza, exceto por algumas diferenças relacionadas à temperatura e parâmetros dependentes da geometria. Porém, a dinâmica dos fluidos obtida nas simulações do reator semi-industrial apresentou características muito semelhantes. As ditas relações de força foram compiladas e apresentadas na Tab. 4.1, indicando a semelhança do trabalho de literatura selecionado com o escoamento do reator da Planta Piloto de Mauá-SP.

Tal estudo permitiu inferir uma boa compatibilidade entre as constantes e adimensionais, corroborando a validação para um bom desenvolvimento do presente modelo. Essa avaliação é de grande relevância na modelagem dos escoamentos, pois permitiu adotar os métodos e modelos teóricos com maior segurança no desenvolvimento do modelo CFD do reator de larga escala da Planta Piloto de Mauá-SP.

Tabela 4.1 – Parâmetros importantes e relações de forças atuantes na fluidização (relações de escala simplificadas). Adaptado de Yang (2003)

Parâmetro	Relação de Forças (Descrição)	(SHAO et al., 2019)	Presente trabalho
$\rho_s u_0 d_p / \mu$	Inércia de partículas / Força viscosa (gás)	4.74×10^3	1.47×10^3
$\rho_f u_0 L / \mu$	Inércia (Gás) / Força Viscosa (Gás)	5.30×10^6	4.54×10^6
u_0 / u_{mf}	Razão de velocidades em relação à mínima velocidade de fluidização (U_{mf})	Mesmos parâmetros	
u_0^2 / g^2	Inércia / Força Gravitacional	4.22×10^{-4}	1.63×10^{-4}
ρ_s / ρ_f	Inércia (sólidos) / Força de Inércia (gás)	5.25	11.77
$G_s / \rho_s u_0$	Fluxo volumétrico recirculante de sólidos / Fluxo volumétrico (gás)	Mesmos parâmetros	
L/D	Altura do leito / Diâmetro do leito	10	7.85
PSD	Distribuição de tamanho de partículas (<i>Particle size distribution</i>)	Mesmo tamanho para todas as partículas*	Mesmo tamanho para todas as partículas
φ	Esfericidade das partículas	Esfericidade constante para todas as partículas (EU-LA)	N/A (EU-EU)

*Para as simulações consideradas para comparação

N/A: não se aplica, devido à abordagem (EU-EU) adotada.

4.1.2.2. Modelos de Arrasto

Uma vez que o *scale-up* do reator do trabalho de (SHAO et al., 2019) se mostrou possível com relação ao reator da Planta Piloto de Mauá-SP, prosseguiu-se com a reprodução desse trabalho da literatura acadêmica a fim de se comparar os principais **modelos de arrasto** disponíveis.

Shao et al. (2019) usaram simulações EU-LA e validação experimental (SUBRAMANI; MOTHIVEL BALAIYYA; MIRANDA, 2007) de um modelo 3D de reator de leito fluidizado para avaliar os efeitos de diferentes parâmetros (temperatura, tamanho de partícula, distribuição e densidade) na velocidade mínima de fluidização, empregando um reator de 0,5 m de altura com uma seção transversal quadrada de 50 mm × 50 mm. O sistema bifásico consistia em ar como fase contínua e areia de sílica como fase dispersa. Este reator operou a 373 K e pressão atmosférica de 101.325 Pa. A fase dispersa foi composta por areia (silício) com massa específica de 2.820 kg m⁻³ e diâmetro de partícula de 0,163 × 10⁻³ m.

A análise completa de fluidização dos autores consistiu em variar a velocidade superficial do gás de 0,005 a 0,06 m s⁻¹, durante 20 s de tempo físico simulado. Da mesma forma, o mesmo sistema de malha regular foi modelado no OpenFOAM para esta

comparação, composto por 49.130 células cuboides simples. Outras malhas refinadas foram testadas para verificar a sensibilidade de malha e uma malha de 156.250 células também foi utilizada na estrutura Euleriana, para realizar as comparações das frações volumétricas, conferindo maior qualidade nas imagens.

O modelo de arrasto empregado por Shao et al. (2019) foi uma combinação das funções fornecidas por Wen e Yu (1966) e Ergun (1952). A Fig. 4.12 mostra a queda de pressão (Δp) e a determinação da velocidade mínima de fluidização (U_{mf}) do sistema fluidodinâmico, que foi de aproximadamente $0,024 \text{ m s}^{-1}$, definida como o ponto de intersecção entre as linhas de tendência da transição de fluidização. Boa concordância entre a simulação e os dados numéricos de Shao et al. (2019) (Fig. 4.12), com erro relativo máximo de 5% na velocidade mínima. Essas simulações foram realizadas utilizando diferentes modelos de arrasto, que tiveram boa correlação com os dados experimentais, em que o modelo de Wen e Yu (1966) forneceu a melhor correlação. Os resultados demonstraram que o modelo Euleriano de duas fases aqui desenvolvido foi capaz de fornecer resultados consistentes com os encontrados na literatura, apesar da utilização da abordagem EU-EU, em face à abordagem EU-LA.

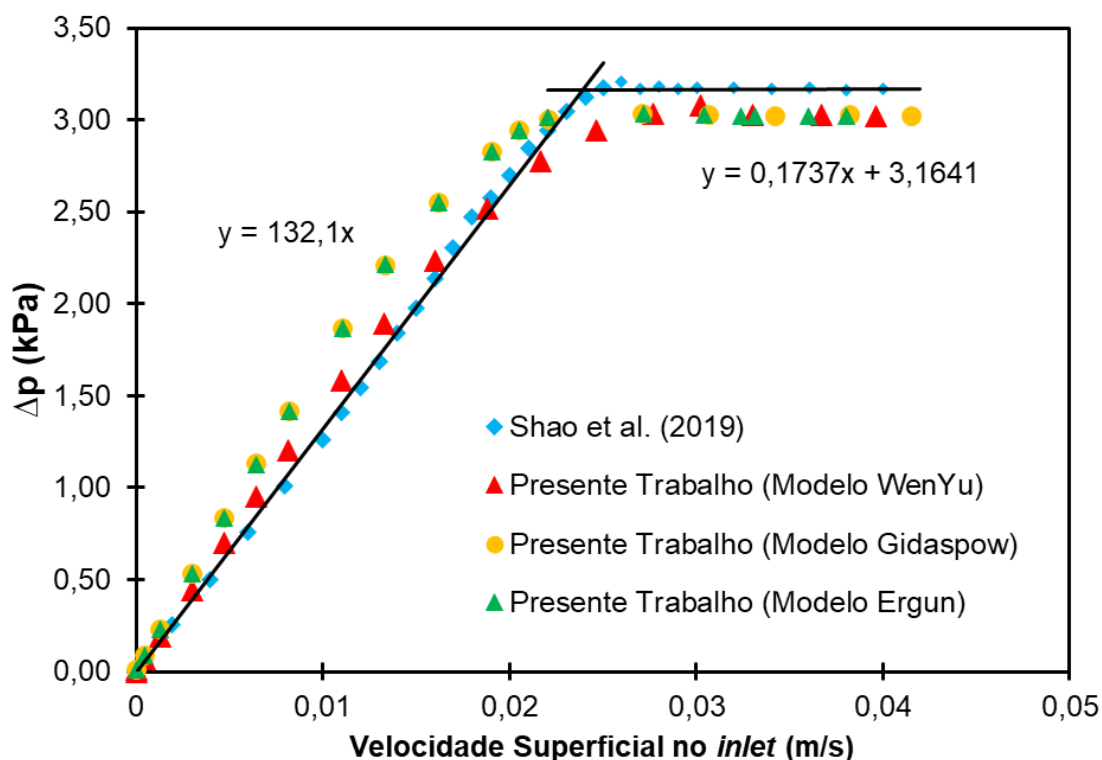


Figura 4.12 – Correlação entre a queda de pressão (Δp) em função da velocidade superficial de insuflamento de ar

A consistência das simulações também foi avaliada em função da temperatura operação do reator (Fig. 4.13). Embora o aumento da temperatura induza mais energia ao sistema – em termos de velocidades relativas, menores viscosidades e maior quantidade de movimento no escoamento –, observa-se que a velocidade mínima de fluidização tende a ser menos influenciada em temperaturas mais elevadas. Tal informação é importante quando se trata de temperaturas em torno de 850 °C pertinente ao reator da Planta Piloto de Mauá-SP. A Fig. 4.13 também indica que a modelagem utilizada possui maior confiabilidade nas temperaturas intermediárias, que apresentaram erro relativo médio de aproximadamente 5%. Esses resultados mostraram boa consistência do modelo ao longo da temperatura.

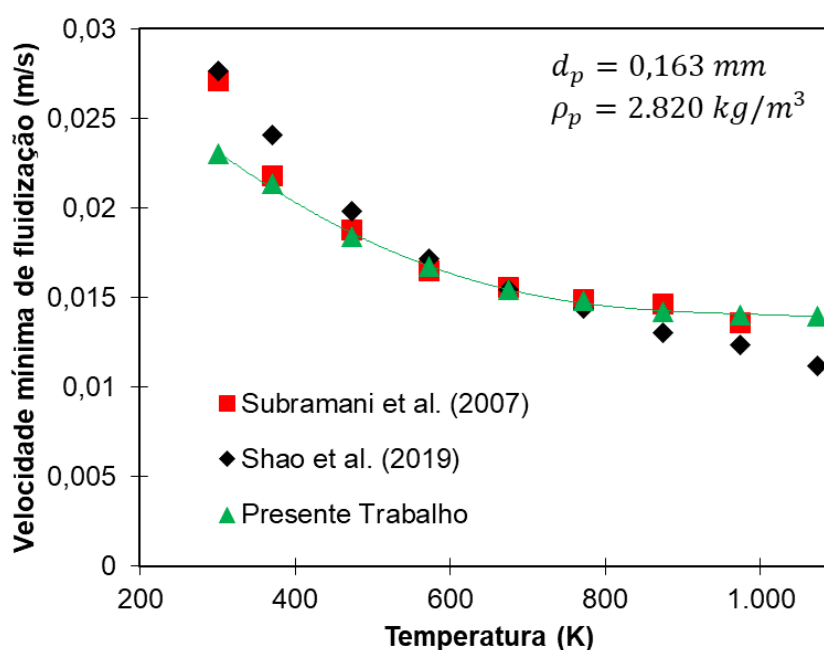


Figura 4.13 – Velocidade mínima de fluidização (U_{mf}) em função da temperatura. Fonte de dados: (SHAO et al., 2019; SUBRAMANI; MOTHIVEL BALAIYYA; MIRANDA, 2007)

Para a comparação das frações volumétricas (Fig. 4.14), a primeira característica observada foi que as estruturas da abordagem EU-EU (a direita de cada par de figuras) e EU-LA (a esquerda de cada par de figuras) apresentavam diferentes níveis de detalhe nas frações volumétricas. Uma desvantagem da abordagem Euleriana é que ela não é capaz de fornecer informações específicas sobre o movimento das partículas. Portanto, uma malha mais refinada (165.250 células) foi utilizada para o modelo Euleriano, a fim de alcançar os mesmos resultados. Por exemplo, nas simulações Lagrangeanas, foi possível observar algumas partículas arrastadas na parte superior do leito, que eram dificilmente visíveis nos resultados Eulerianos. Por outro lado, as regiões de vazio, formação e coalizão de bolhas foram bem

descritas. Foram simuladas diferentes etapas da fluidização (Fig. 4.14), utilizando as velocidades entre 0,08 e 0,2 m s⁻¹, o que foi importante para a caracterização do reator fluidizado. Outros parâmetros quantitativos, incluindo fração mássica de partículas (máxima de 0,55) e altura do leito (entre 0,23 e 0,26 m), foram obtidos para as mesmas condições de simulação de velocidade de entrada do gás. Os resultados obtidos com o referencial euleriano também foram influenciados pela interpolação pós-processamento dos dados. Contudo, a similaridade dos resultados foi confirmada pelos parâmetros quantitativos mencionados acima.

Comparada à abordagem Lagrangeana, a modelagem Euleriana TFM requer uma malha mais fina para melhorar a precisão numérica (ADNAN et al., 2021). Porém, os parâmetros puderam ser analisados com a mesma malha adotada por Shao et al. (2019), exceto a fração volumétrica de partículas, que foi analisada com malha refinada, a fim de adquirir informações mais detalhadas.

A principal constatação dessas simulações foi que o referencial Euleriano tem uma limitação significativa na reprodução do movimento das partículas, em comparação com a abordagem Lagrangeana. Mesmo com uma malha mais grosseira, as partículas Lagrangeanas parecem, de fato, ser independentes do restante do domínio das partículas sólidas. Entretanto, conforme demonstrado, todas as características e parâmetros quantitativos foram consistentes entre as abordagens em comparação.

O estudo de Shao et al. (2019) foi selecionado, devido à semelhança das características fluidodinâmicas (Tab. 4.1) em relação ao tipo de escoamento Planta Piloto de Mauá-SP, mostrando diferenças quantitativas devido às características geométricas internas dos reatores. São reatores que têm boa correlação, apesar de possuírem, por exemplo, altura livre de escoamento (*freeboard*) bem diferentes, o reator de Shao et al. (2019) com 0,5 m e o reator semi-industrial da Planta Piloto de Mauá-SP de 9,975 m. Embora esta diferença não tenha qualquer efeito substancial na dinâmica dos fluidos do leito fluidizado, ela pode ter uma influência importante nas reações químicas.

O estudo comparativo completou a validação qualitativa e quantitativa da modelagem computacional com relação aos modelos de arrasto, mostrando que ela é capaz de fornecer resultados consistentes para os fenômenos de fluidização em reatores de larga escala.

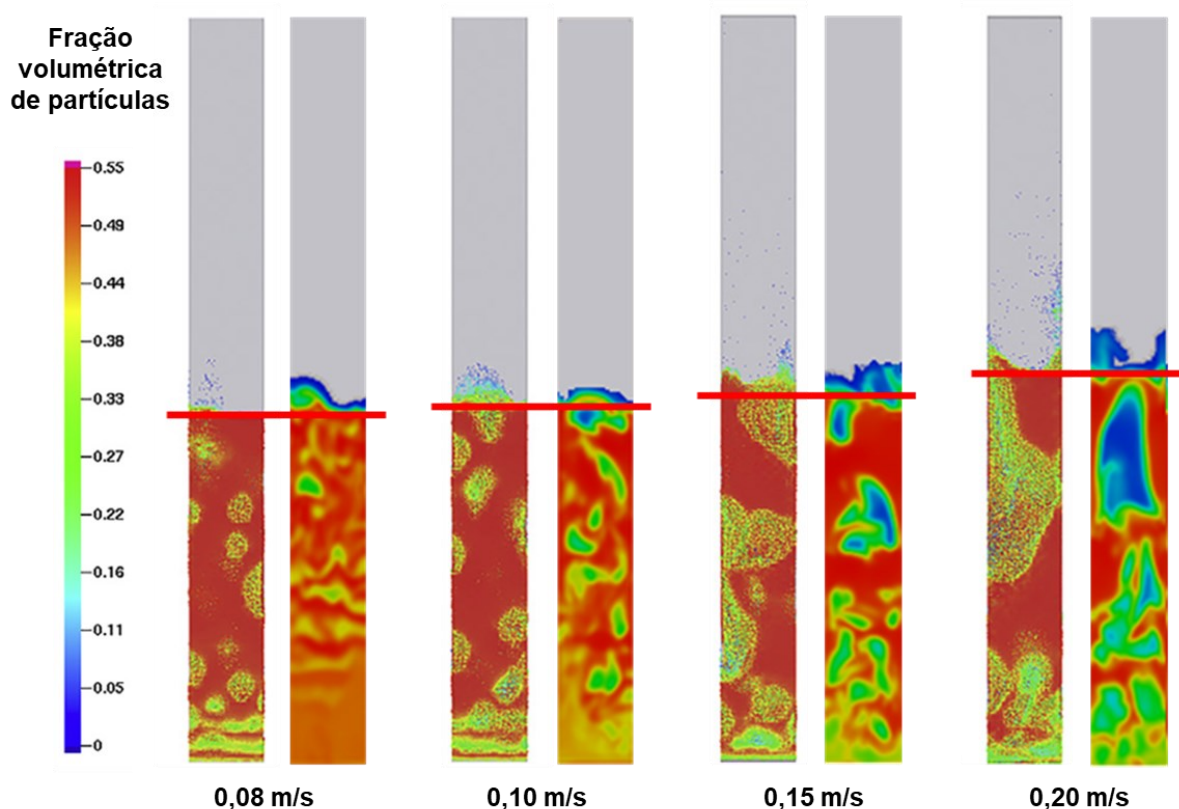


Figura 4.14 - Fração volumétrica da fase sólida obtida no presente trabalho (direita de cada par) comparada ao trabalho de Shao et al. (2019) (esquerda de cada par) em diferentes velocidades superficiais de insuflamento de ar

4.1.2.3. Regimes de Fluidização em larga escala

Em seguida, a validação fluidodinâmica do modelo foi realizada buscando reproduzir os diferentes tipos de **Regimes de Fluidização**, mencionados na Seção 3.6, para um reator de larga escala, alcançar em simulações o mesmo regime de escoamento borbulhante observado no reator da Planta Piloto de Mauá-SP e comparar com as imagens de vídeo captura realizados *in loco* durante a operação do mesmo.

Essa seção corresponde a uma das primeiras avaliações da abordagem Euleriana-Euleriana aplicada na simulação CFD de um reator de **larga escala**. A abordagem euleriana se mostrou satisfatória para aplicação do reator da Planta Piloto de Mauá-SP e aprovada para posteriores implementações das reações químicas da gaseificação.

Os regimes de fluidização, apresentados na Seção 3.6, foram obtidos variando-se a velocidade de insuflamento do ar de 0,0005 a 0,96 m s⁻¹ e demais parâmetros conforme a Tab. 4.2.

Tabela 4.2 - Condições iniciais e parâmetros configurados para obtenção dos Regimes de Fluidização do reator de larga escala

Parâmetro	Valor
Vazão mássica de biomassa, kg/h	N/A
Temperatura da biomassa, K	N/A
Densidade da biomassa, kg/m ³	N/A
Termo fonte de massa, kg/s	$29,9861 \times 10^{-3}$
Termo fonte de energia, J/s	$78,2504 \times 10^{-3}$
Densidade da areia, kg/m ³	1.660
Diâmetro da areia, m	$0,5 \times 10^{-3}$
Velocidade Intersticial do ar	
• Mapeamento de regimes de fluidização, m/s	0,0005 – 0,96
• Operação contínua, m/s	0,056
Temperatura do ar de entrada, K	673
Temperatura de Operação, K	1.123
Condição das paredes, --	Isoladas
Pressão de entrada, kPa	130
Pressão de saída, kPa	Atmosférica

N/A – Não se aplica

A Fig. 4.15 mostra a avaliação da sensibilidade dos resultados ao número de células da malha utilizada (Fig. 4.15a) e a convergência de malha (Fig. 4.15b), representada pelo coeficiente de correlação de variação do parâmetro avaliado. A pressão ao longo do eixo axial (coordenada z) do reator foi escolhida como parâmetro de análise de convergência de malha. Apesar do coeficiente se apresentar acima de 0,970 para todos os casos, a malha de 16.744 células foi selecionada nesta modelagem dos fenômenos de fluidização por atender aos requisitos computacionais e de precisão de resultados.

Um perfil linear de pressão foi encontrado na região do leito. Isso se deve às forças de arrasto causadas pelas partículas de areia do leito. O valor estimado da queda de pressão foi de quase 10 kPa/m (Fig. 4.15). O perfil de queda de pressão foi obtido a partir do enchimento com aproximadamente 2.390 kg de areia, calculado pela Eq. (3.37). A Fig. 4.16 mostra o comportamento da pressão de entrada ao longo do tempo de simulação até a sua estabilização.

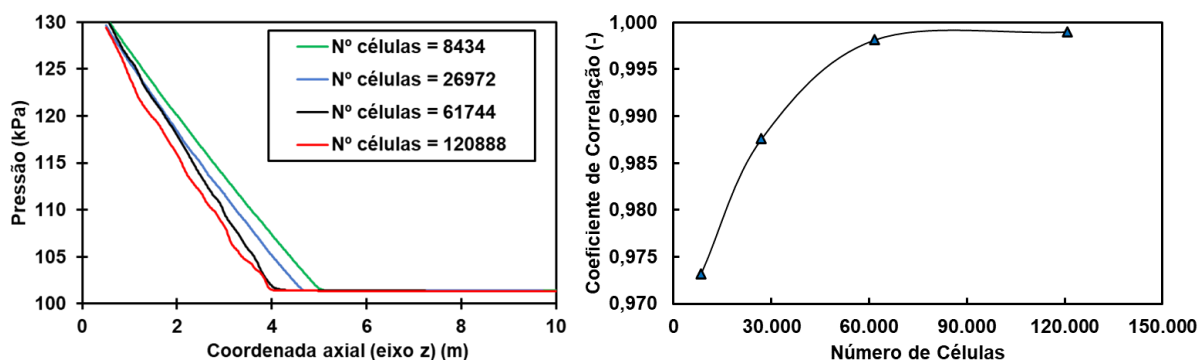


Figura 4.15. Avaliação da Convergência de malha. (a) Pressão ao longo do eixo longitudinal do reator em função da coordenada z. (b) Coeficiente de Correlação da variação da pressão em função do número de células da malha

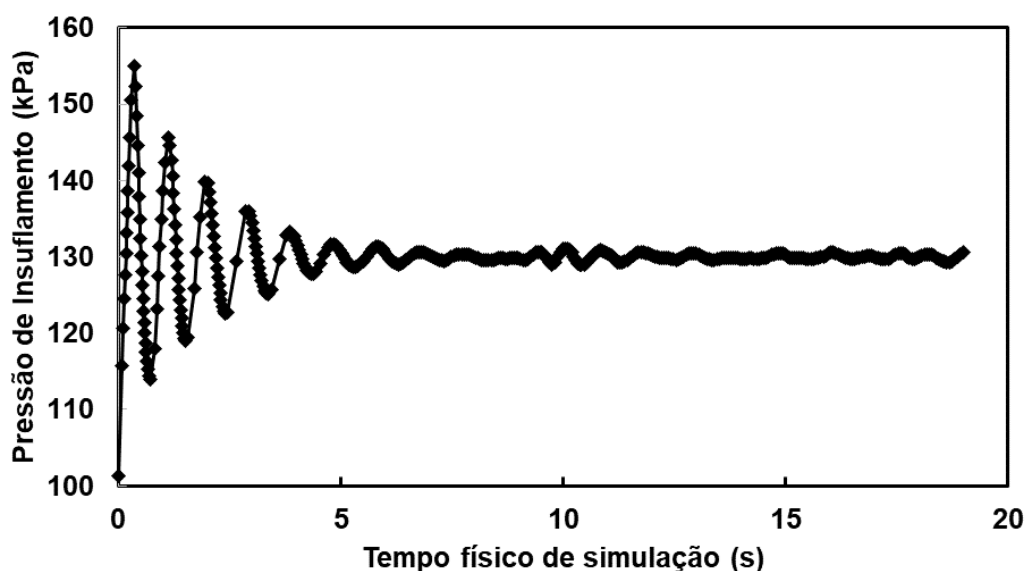


Figura 4.16. Estabilização da pressão de entrada ao longo do tempo de simulação em regime borbulhante

A Fig. 4.17 mostra o aspecto geral da fluidização do leito com uma escala de cor em termos da fração volumétrica de partículas. O parâmetro de velocidade intersticial do ar de entrada foi variado de 0,0005 m/s a 0,96 m/s para obtenção dos principais regimes de fluidização descritos na literatura (KUNII; LEVENSPIEL, 1991). À medida que a velocidade aumenta, as transições entre regimes de baixa fluidização até fluidização turbulenta são claramente observadas. O primeiro regime (Fig. 4.17a) é uma condição de leito fixo, caracterizada pela maior fração de partícula volumétrica observada. A velocidade mínima de fluidização para o reator simulado da planta piloto encontrada foi de 0,004 m/s (superficial) e $8,32 \times 10^{-4}$ m/s (intersticial). Na Fig. 4.17b, as partículas de areia têm movimento reduzido,

formando um leito poroso uniforme, que caracteriza o regime de mínima fluidização. Na Fig. 4.17c, ocorre fluidização suave (*smooth*), em que as partículas têm movimentação mais elevada. A Fig. 4.17d é caracterizada pela transição entre a fluidização suave e borbulhante, que pode ser mais bem evidenciada na Fig. 4.17e, onde as bolhas são mais recorrentes. Na condição de Fig. 4.17f, as partículas de areia tendem a ser arrastadas acima do leito e o fluxo turbulento pode aumentar as taxas de reação nos reatores. O mapeamento dos regimes de fluidização é importante e pode servir inclusive para prever a quantidade de material de leito que eventualmente será arrastada para o tubo de extração de cinzas do mesmo. A velocidade mínima de fluidização encontrada foi de 0,004 m/s, conforme a Fig. 4.17.

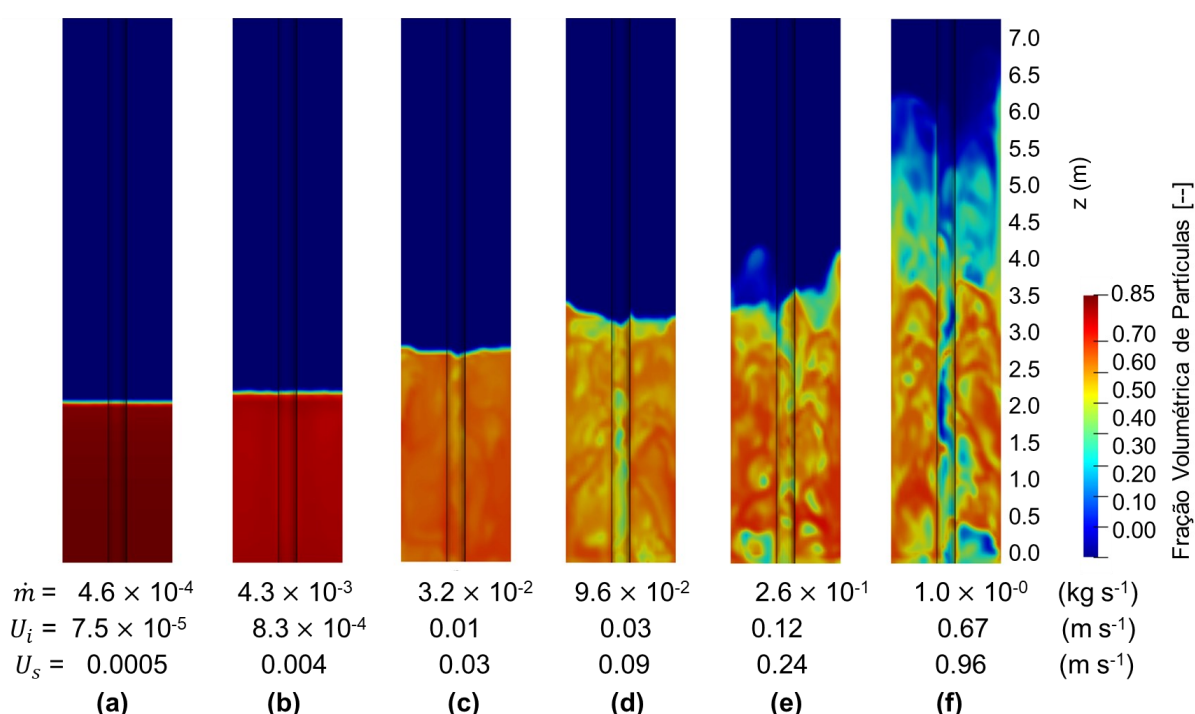


Figura 4.17. Regimes de fluidização do reator em geometria simplificada (Planta Piloto de Mauá-SP), obtidos variando-se as vazões mássicas ($\dot{m}$), velocidades intersticiais (U_i) e superficiais (U_s)

A mesma caracterização do reator quanto aos Regimes de Fluidização foi conduzida com a presença do ciclone interno do reator, conforme mostrado na Fig. 4.18. Nessa ocasião, constatou-se que, para o regime de fluidização borbulhante, alvo no presente trabalho, a presença do ciclone não interfere no escoamento à montante, o que permitiu suprimir essa geometria, conforme mencionado na Seção 3.4.

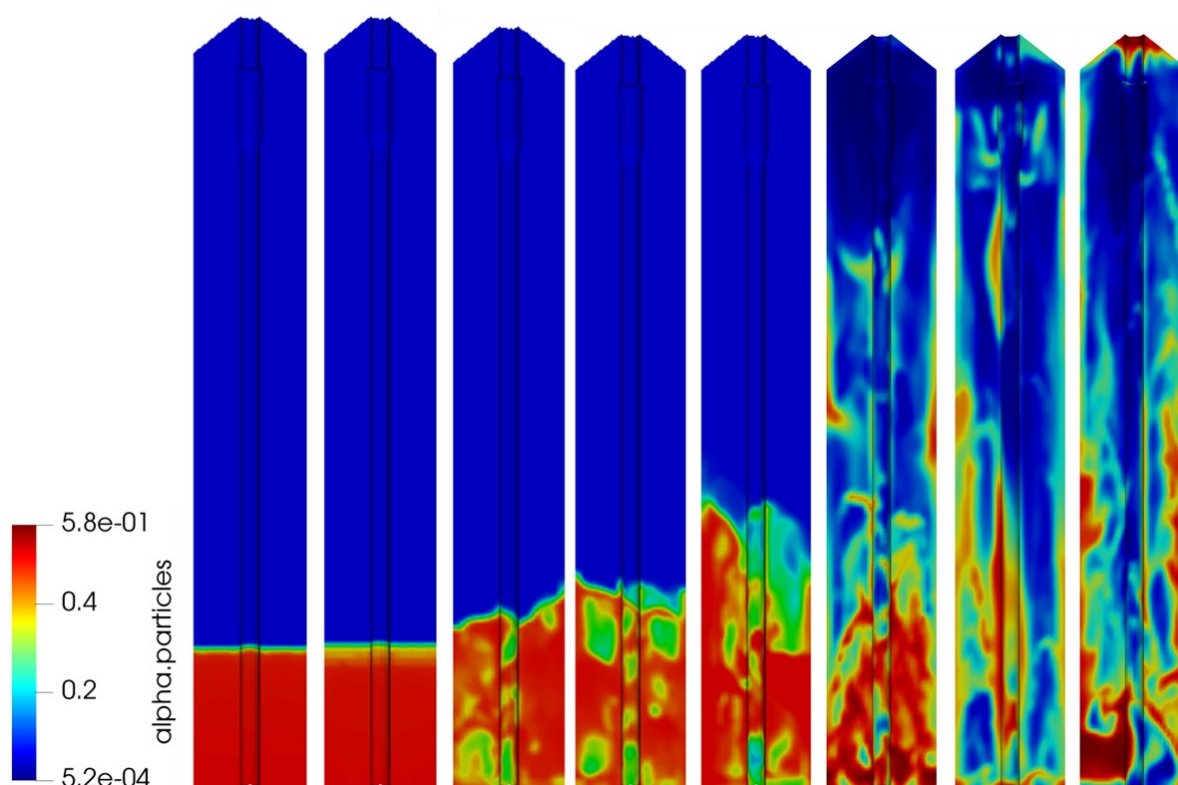


Figura 4.18 - Regimes de fluidização do reator em geometria real (Planta Piloto de Mauá-SP). Cada figura (da esquerda para a direita) apresenta a fração mássica de partículas (*alpha.particles*) do reator operando em velocidades de insuflamento com aumentos sucessivos

Todos esses regimes de fluidização foram obtidos atingindo-se a condição estável de operação em regime permanente do reator, em que a pressão do ar de entrada permanece oscilando em torno do valor esperado de pressão (130 kPa), i.e., em instantes $t \geq 5 \text{ s}$ (Fig. 4.16). A Fig. 4.19 indica o aspecto geral do leito fluidizado em condição de operação normal do reator da Planta Piloto de Mauá-SP – sob regime de escoamento borbulhante de fluidização. De acordo com Sasic et al. (2006), a frequência da pressão do leito está relacionada à formação de bolhas, que produzem ondas de pressão que se propagam por todo o sistema (*plenum* de ar, linhas de abastecimento de ar, etc.). Esses efeitos podem causar mudanças significativas no perfil de velocidade em alturas superiores (HAGHGOO; BERGSTROM; SPITERI, 2018) e provavelmente nas taxas de reação química no reator. No entanto, sua influência não foi investigada no presente trabalho. Para a maioria das simulações realizadas, levou aproximadamente 10 segundos de tempo físico para atingir a condição estabilizada, na qual a pressão de entrada permanece quase constante.

Mapeados os regimes de fluidização do reator de escala semi-industrial, as informações quando da sua operação em regime permanente na Planta Piloto de Mauá-SP (Fig. 4.19) foram inseridas no modelo computacional para estudo de sua fluidodinâmica.

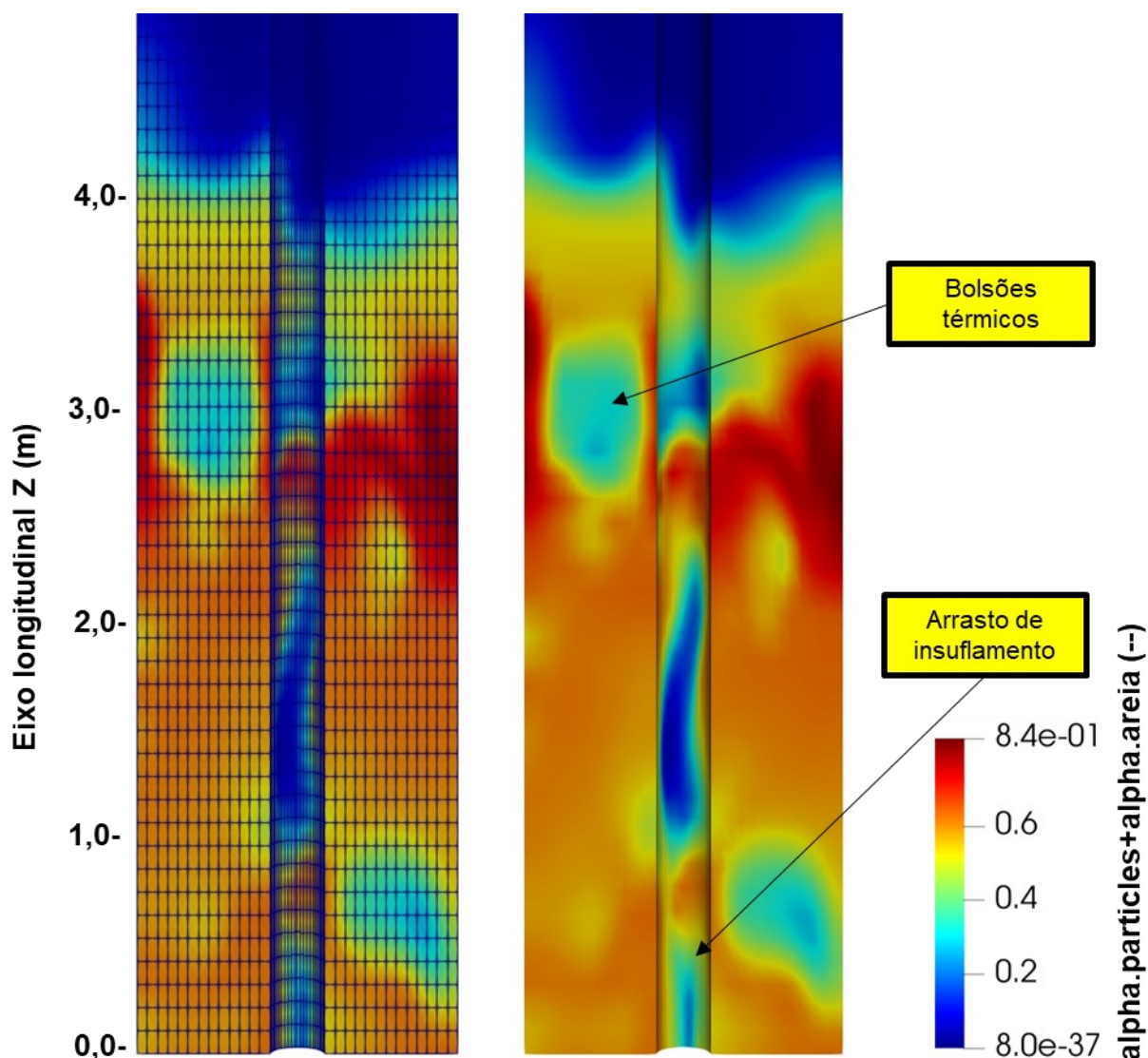


Figura 4.19 – Detalhes do leito fluidizado do reator de larga escala em condições de operação continua. Cálculo soma das frações mássicas das fases de areia e partículas (CDRSU)

A Fig. 4.20a mostra a distribuição de pressão do reator, que assume o maior valor na superfície de entrada do reator, mas diminui gradualmente em toda a região do leito, semelhantemente ao perfil de pressão demonstrado na Fig. 4.15a. No perfil de pressão (Fig. 4.20b) em comparação com a distribuição de partículas do leito (Fig. 4.20c) é possível ainda identificar a interface entre o leito e fluido, onde a pressão começa a se estabilizar.

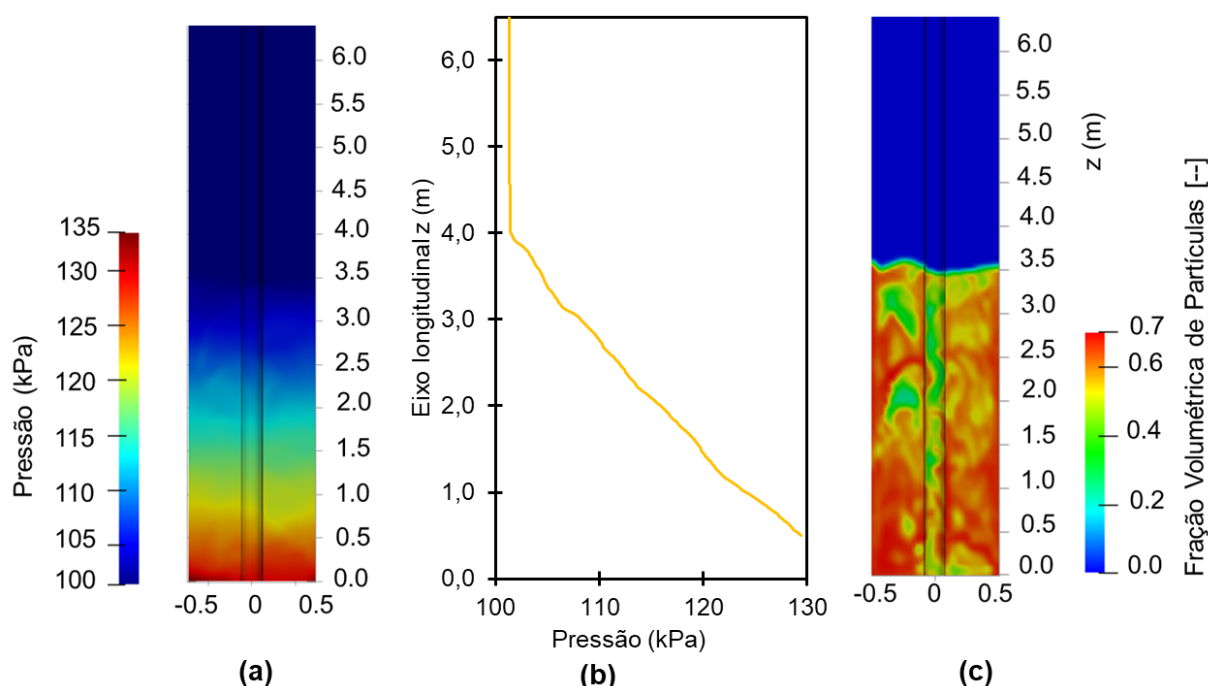


Figura 4.20. (a) Pressão ao longo do reator e seu respectivo (b) gráfico e (c) fração volumétrica de partículas

Por meio das simulações, observou-se que o padrão de leito fluidizado predominante era o borbulhante (Fig. 4.20) em condições operacionais contínuas. Com base nos resultados da Fig. 4.20c, ao longo do escoamento ascendente dos gases, observa-se a formação de algumas bolhas de ar, onde a fase gasosa começa a se agrupar em uma fase quase coesa. Na parte superior do leito fluidizado, as bolhas adquirem formas arredondadas, espalhadas na superfície. Algumas outras bolhas de ar podem não ser claramente distinguidas devido a interpolação de imagem de software, que suaviza a interface entre as partículas de ar e areia. Esta característica é adequada para as reações de gaseificação causando uma distribuição de calor homogênea. Utilizando os resultados apresentados na Fig. 4.20 e pela Eq. (3.38), foi determinada a fração de vazio do leito (ϵ), por meio do cálculo do valor médio da fração volumétrica na região do leito. Para comparação, a fração de vazio nessa condição é de cerca de 0,504, contra 0,633 na condição mínima de fluidização (ϵ_{mf}), o que indica que o reator funciona em uma condição de aproximadamente 80% da densidade máxima possível do leito.

Quanto à velocidade relativa entre as fases (Fig. 4.21c), os maiores valores deste parâmetro foram encontrados logo acima da interface do leito, na cota de 3,5 m de altura. Isso pode ser explicado pela expansão volumétrica ocorrida devido a conversão da fase sólida de biomassa em gases. O parâmetro da velocidade relativa também pode ser usado para identificar as regiões reativas no interior do reator. Uma vez que o software possibilita a aquisição de informações de velocidades relativas da fase gasosa e a fração volumétrica de

cada espécie, pode-se identificar as zonas em que ocorrem preferencialmente cada uma das reações heterogêneas (i.e. com expansão gasosa).

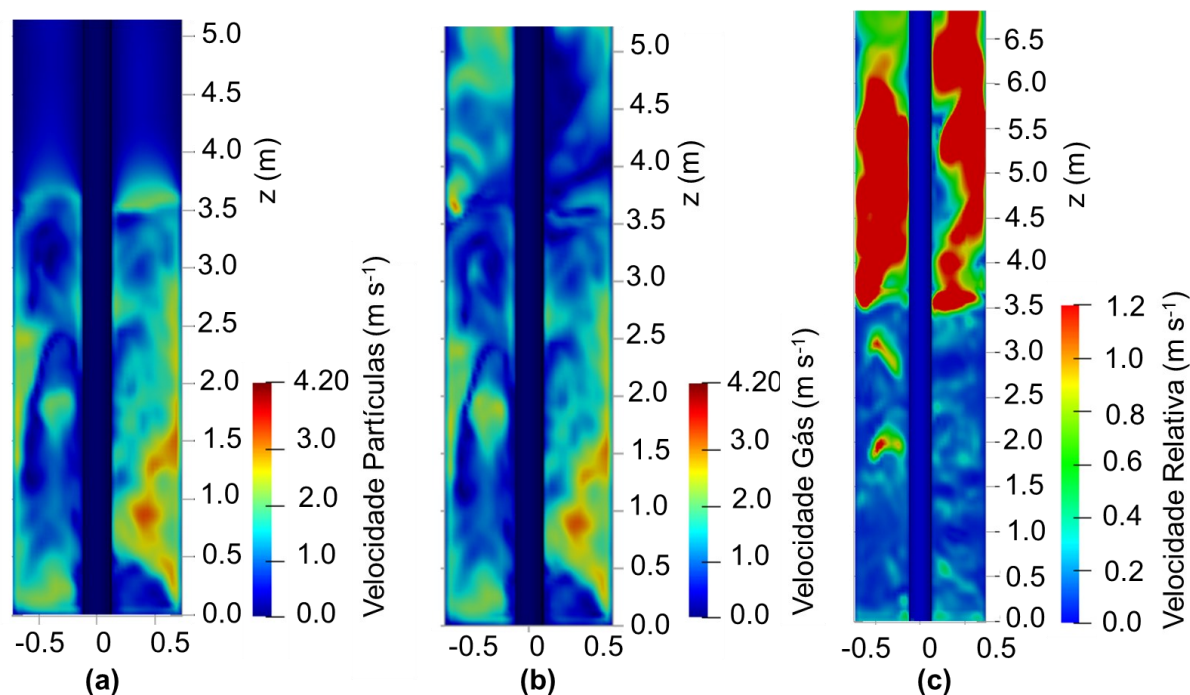


Figura 4.21. Regime borbulhante de fluidização quando da operação contínua do reator

4.1.2.4. Vídeo-captura do escoamento real da Planta Piloto de Mauá-SP

Quanto ao movimento interno do leito fluidizado, os resultados de captura de vídeo (Fig. 4.22 e 4.23) e simulações indicaram uma boa correlação qualitativa. A visibilidade do movimento interno foi parcialmente comprometida devido à neblina criada pelas partículas mais finas em suspensão no escoamento. Quando a injeção de ar foi iniciada, o padrão de fluidização suave (*smooth*) foi evidenciado pela formação de algumas pequenas bolhas, marcadas com círculos azuis na Fig. 4.22. As mesmas características foram observadas nas simulações, semelhantes à Fig. 4.17c. À medida que a velocidade do ar aumenta, as bolhas se tornam maiores e mais frequentes (demonstradas pela maior quantidade de bolhas marcadas na Fig. 4.22). Quando o reator atinge seu regime de operação estável, correspondendo às últimas quatro imagens da Fig. 4.22, a presença de vários espaços vazios e bolhas e o fluxo turbulento indicam o padrão de fluidização borbulhante. Seu correspondente das simulações é aproximadamente igual ao observado na Fig. 4.17e.

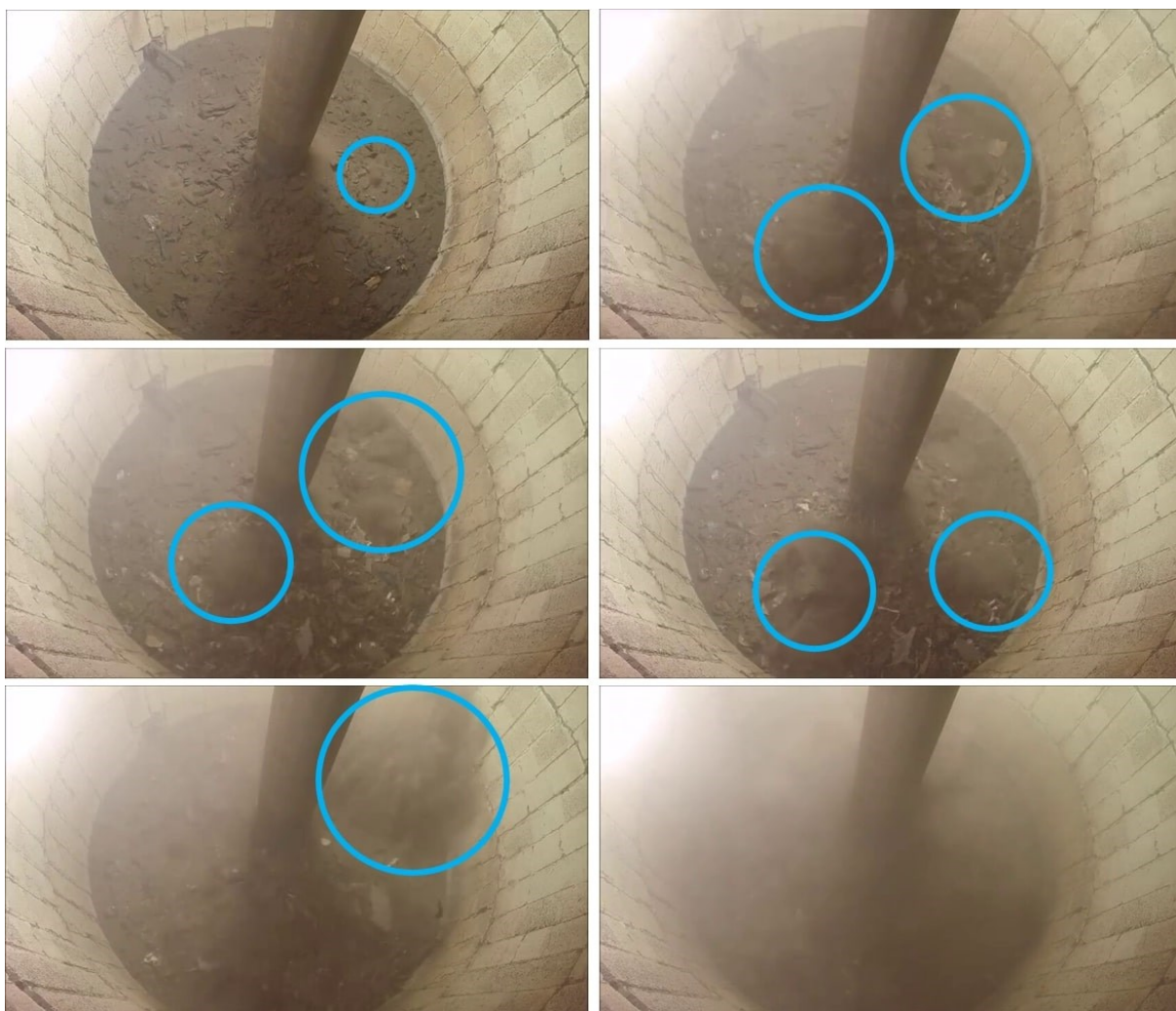


Figura 4.22. Aspectos qualitativo da fluidização borbulhante em temperatura ambiente do reator de escala semi-industrial da Planta Piloto de Mauá-SP. Material de leito: areia de sílica e CDR. As marcas azuis indicam a formação de bolhas conforme o aumento do fluxo de ar de entrada



Figura 4.23 – Imagens em sequência da vídeo-captura do reator da Planta Piloto de Mauá-SP em operação. Marcações identificando bolsões de ar insuflado

4.1.3. Validação Termoquímica

4.1.3.1. Simulações envolvendo a termoquímica da Devolatilização

A primeira avaliação realizada a respeito das implementações da química envolvida no processo foi o estudo e validação do subprocesso de **devolatilização** de biomassa. Nesse sentido, as implementações da equação do balanço de espécies (3.41) e seus termos fontes foram avaliadas utilizando-se de uma geometria simplificada (vide melhor detalhamento no

APÊNDICE I, Seção 6.1) e, posteriormente, aplicada na geometria real do reator da Planta Piloto de Mauá-SP.

A Fig. 4.24 apresenta composição geral do reator de geometria simplificada ao fim do processo. As partículas de biomassa (*alpha.particles*), menos densas que a areia (*alpha.areia*), se concentram na parte superior do leito borbulhante fluidizado. O carbono formado (*char.particles*) segue o mesmo padrão, o que favorecerá as reações heterogêneas ainda não implementadas para conversão de carbono em produtos gasosos. A produção de carbono se dá de forma contínua de acordo com as taxas de devolatilização adotadas no processo. A fração de vazio do leito fluidizado quando da estabilização do leito é de cerca de 0,5.

As frações mássicas do gás produzido resultante do processo de devolatilização foi de 0,08179 kg/kg de H₂O, 0,05971 kg/kg de CO₂, 0,12799 kg/kg de CO, 0,04335 kg/kg de H₂, 0,14804 kg/kg de O₂, 0,52480 kg/kg de N₂ e 0,01431 kg/kg de CH₄. A Fig. 4.25 demonstra o aspecto da presença das espécies gasosas produzidas no processo de devolatilização da biomassa no fim da simulação. Ao fim do tempo de simulação adotado (300 s), o sistema permaneceu com a mesma quantidade de areia e aproximadamente a mesma massa de ar em escoamento, enquanto o montante de partículas restante foi de 0,06346 kg de partículas; sendo 83% de massa de biomassa consumível e 17% de carbono produzido. Ou seja, aproximadamente 40% da partícula de biomassa foi consumida dando origem aos gases de devolatilização.

Uma vez que o objetivo é, por hora, verificar a modelagem da devolatilização, os resultados dessa seção não foram comparados a outros trabalhos de literatura. Quando as outras reações heterogêneas e homogêneas foram implementadas, será possível comparar tais resultados com dados experimentais de validação. Dessa forma, a consistência do modelo foi avaliada pelo balanço de massa e pela progressão da formação contínua dos produtos ao longo do tempo.

A Fig. 4.26 exhibe os resultados na condição em regime permanente do sistema, em termos de pressão (a), velocidade do ar (b), velocidade das partículas (c) e velocidade da areia (d). A pressão do ar de entrada nesta condição foi de 105.077 Pa e a velocidade máxima observada foi de aproximadamente 1,4 m/s da fase de ar através da placa livre do reator.

A Fig. 4.27 mostra a produção de espécies de gás em função do tempo de simulação. Nos tempos iniciais, os componentes do ar (O₂ e N₂), que preenchem a fase gasosa por todo o reator, começam a decair e dar lugar às espécies gasosas produzidas pela devolatilização. No final da simulação, todas as espécies tendem a atingir um regime estável, conforme o esperado, indicando boa consistência da implementação nas simulações.

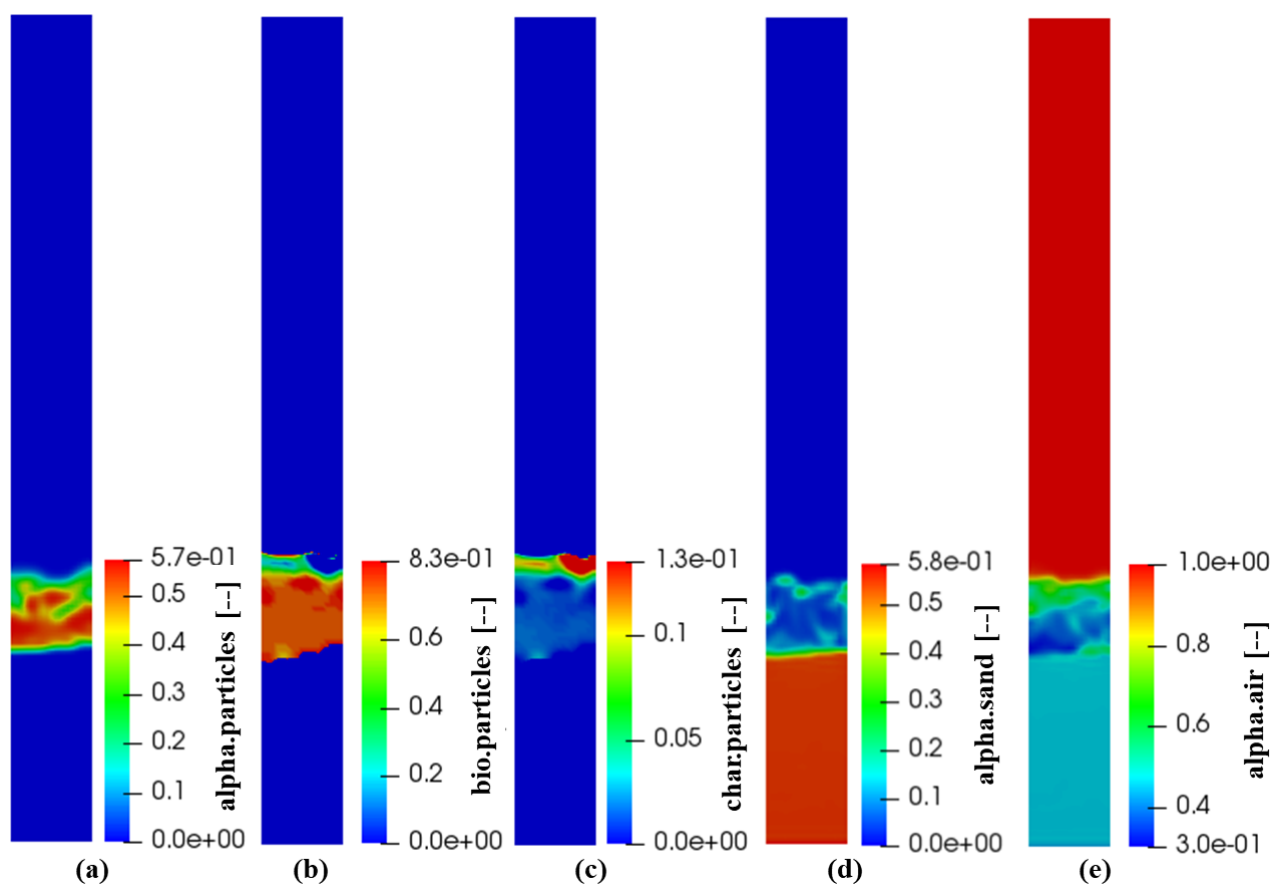


Figura 4.24. Aspecto geral das frações volumétricas de (a) partículas sólidas, (b) biomassa, (c) carvão (*char*), (d) areia e (e) ar em condição estável de operação

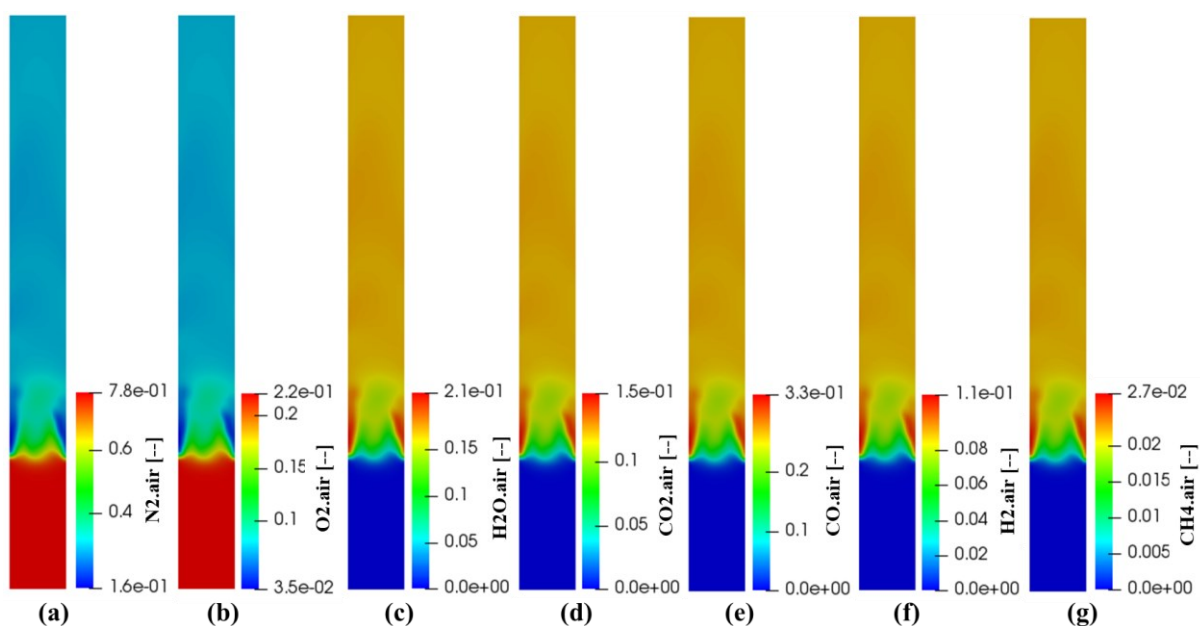


Figura 4.25. Representação das frações volumétricas das espécies gasosas no estágio final de simulação

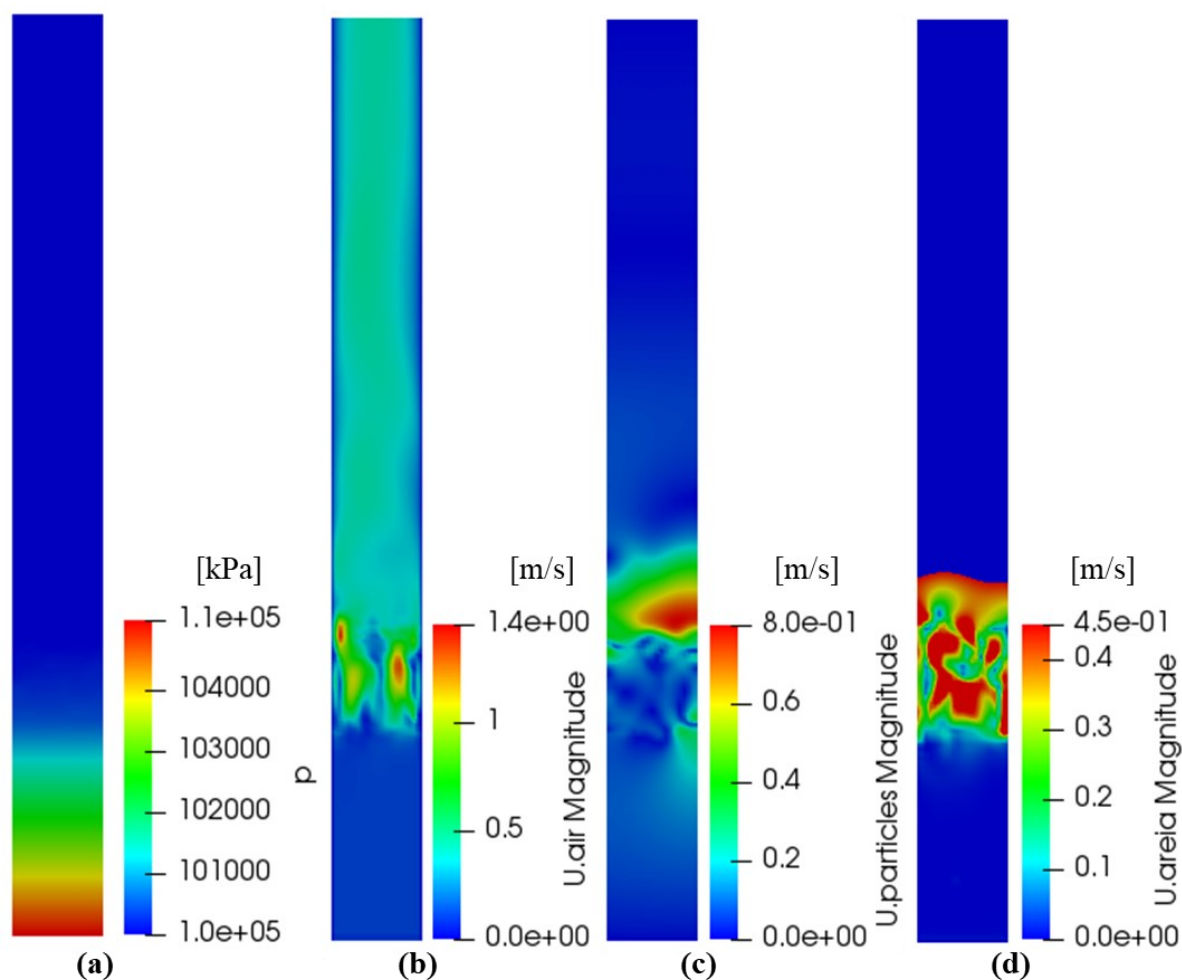


Figura 4.26. Representação da (a) pressão, (b) velocidade do ar, (c) velocidade de partículas e (d) velocidade da areia no estágio final de simulação

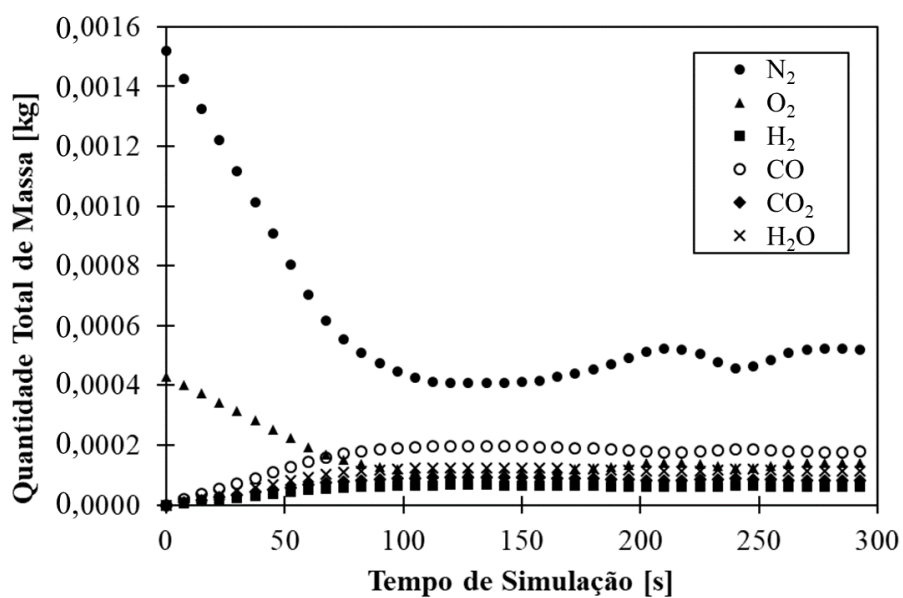


Figura 4.27. Produção de gases da devolatilização ao longo do tempo

O modelo computacional foi capaz de reproduzir com boa consistência a conversão de biomassa em carbono e gases por meio da reação de devolatilização, considerando ainda o balanço de massa e de quantidade de movimento. Tais resultados foram apresentados nos seguintes eventos acadêmicos:

- *26° Congresso Internacional de Engenharia Mecânica (COBEM-2021)* (MONTEIRO et al., 2021b);
- *30° Simpósio da Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (POSMEC-UFU 2021)* (MONTEIRO et al., 2021c) e
- *8ª Escola de Combustão (EdC-2021)* (MONTEIRO et al., 2021a).

Em seguida, foram implementadas demais reações heterogêneas e homogêneas, conforma apresentado no trabalho de (QI et al., 2019), contendo não somente a devolatilização. Esses resultados foram apresentados na seção a seguir e sua validação permitiu a implementação dessas reações de forma análoga ao modelo com a geometria real do Reator da Planta Piloto de Mauá-SP.

4.1.3.2. Reprodução da segunda parte do trabalho de (QI et al., 2019)

Na comparação de resultados obtidos por simulação e por experimentos do trabalho de (SONG et al., 2012), foi feita a avaliação da composição do gás de síntese obtido. O histograma da Fig. 4.28 apresenta esse comparativo para as espécies gasosas de H_2 , CO , CO_2 e CH_4 . O erro relativo máximo obtido com relação aos resultados experimentais foi de 7%, indicando boa correlação na obtenção do syngas em mesmas condições daqueles autores.

Qualitativamente, também foi feita a avaliação da quantidade de movimento para caracterização do escoamento do reator desse trabalho. Apesar desses resultados terem atributos visuais distintos, devido às abordagens utilizadas, é possível observar a correlação do escoamento interno, apresentado em escala nas Fig. 4.29 e 4.30, respectivamente para os resultados do presente trabalho e aqueles apresentados pelos autores. Verifica-se que os níveis de velocidades, a distribuição de partículas zonas de maior turbulência e desaeração, altura máxima atingida pelo particulado sólido do leito, tamanho de bolhas e vazios, arraste de partículas e outros aspectos se dão de forma bastante similar.

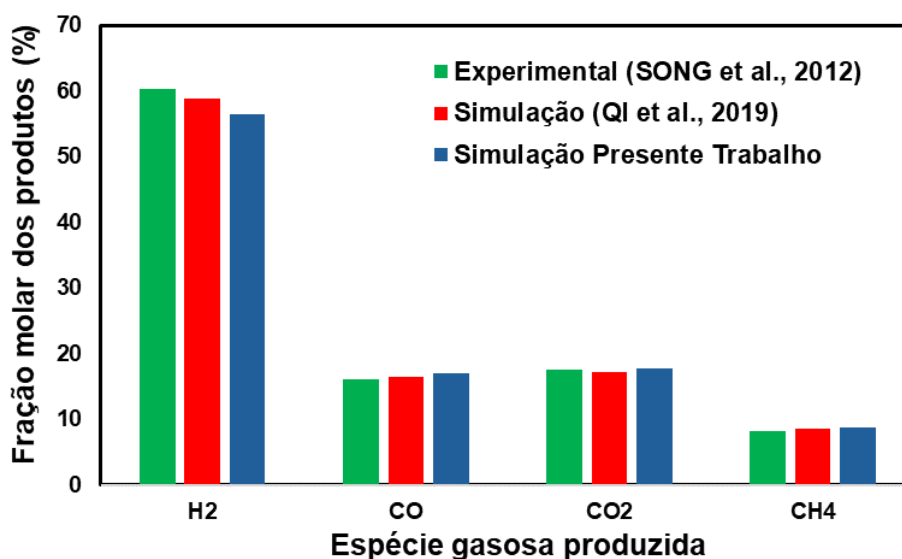


Figura 4.28 – Comparativo de fração molar das espécies gasosas produzidas por simulações e experimentalmente

Outro resultado qualitativo apresentado pelos autores Qi et al. (2019) foi o de distribuição de temperaturas dos sólidos (Fig. 4.31), em que os autores ressaltaram a presença de pontos menos quentes de biomassa injetada à temperatura inferior ao leito de temperatura uniforme próximo de 820 °C. Também foi observado a presença de partículas de biomassa arrastadas devido à diminuição gradativa do diâmetro causada pela pirólise. Porém, na distribuição de temperaturas de sólidos obtida no presente trabalho para essa comparação (Fig. 4.32) essa característica não é observada, uma vez que o fenômeno de *shrinkage* (diminuição de diâmetro) da biomassa não foi considerada no presente modelo.

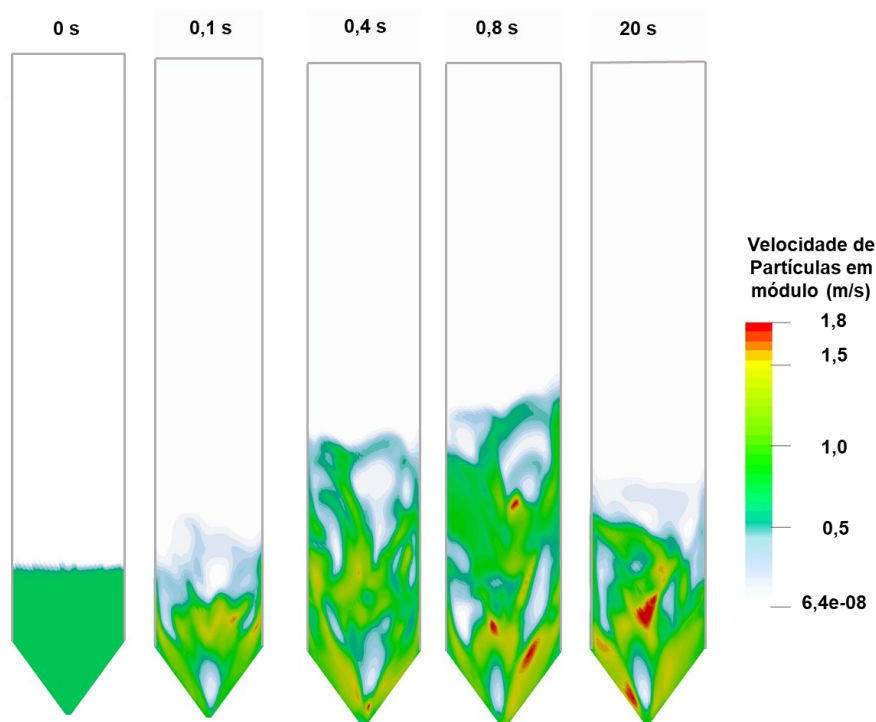


Figura 4.29 – Velocidade de partículas (areia e biomassa) instantânea da simulação comparativa sob abordagem Euleriana

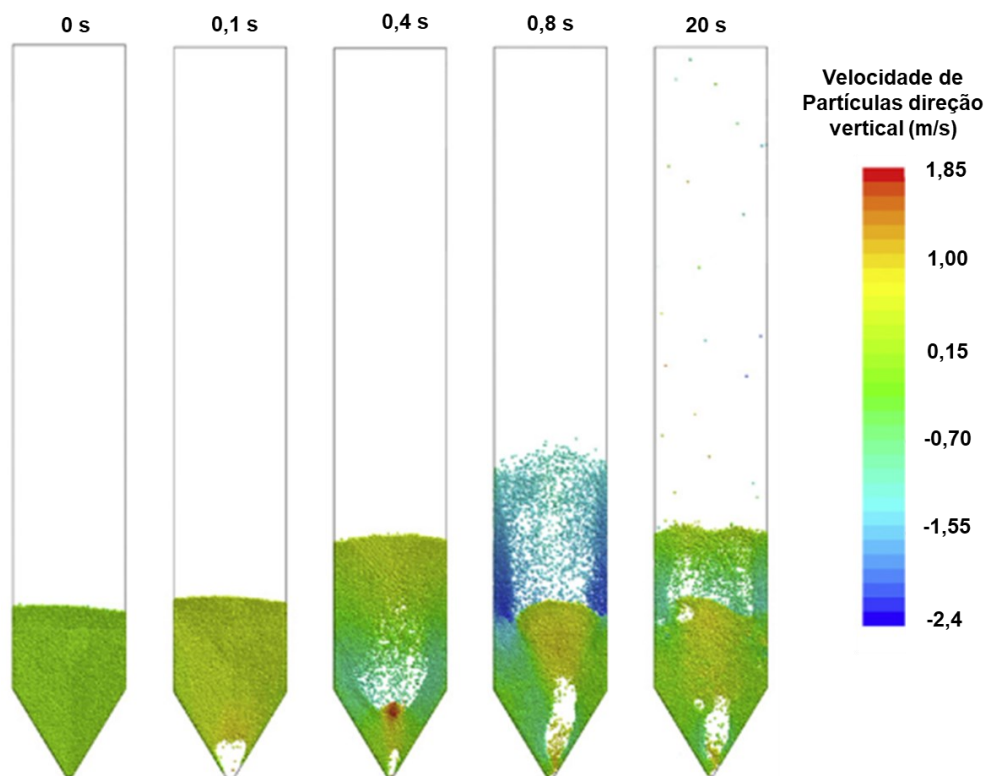


Figura 4.30 – Velocidade instantânea de partículas sólidas simulado sob abordagem Lagrangeana. Adaptado de (QI et al., 2019)

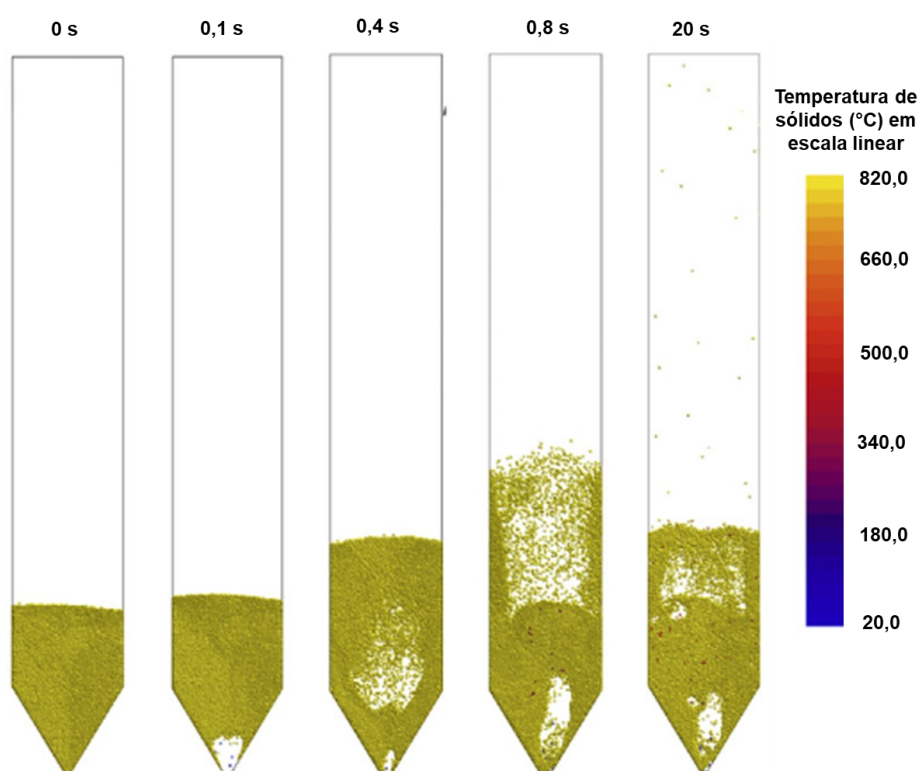


Figura 4.31 – Distribuição de temperatura de sólidos obtida por simulação. Adaptado de Qi et al. (2019)

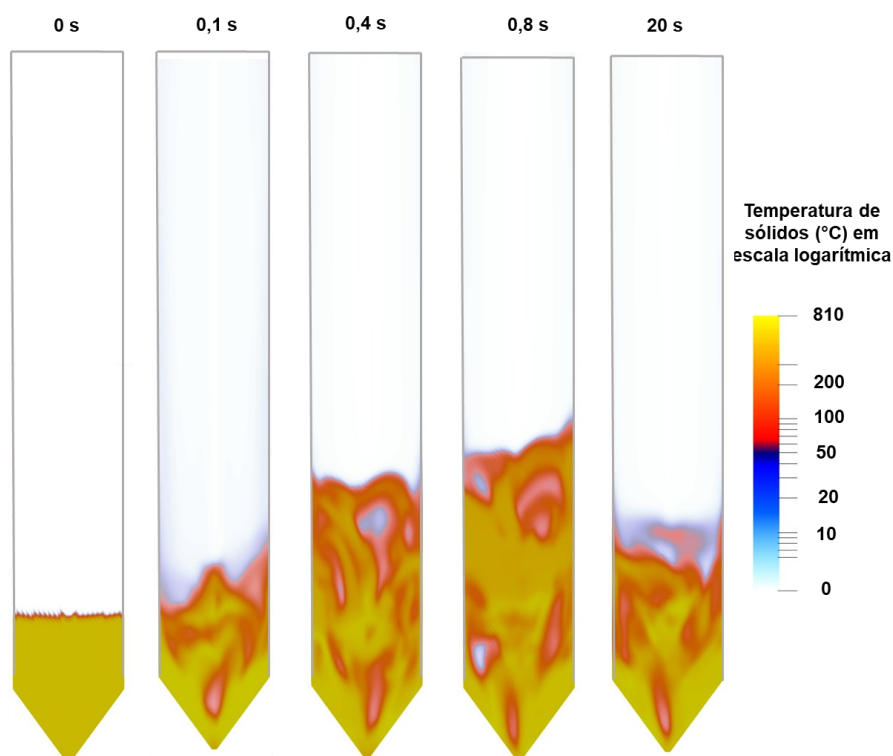


Figura 4.32 – Distribuição de temperatura de sólidos (biomassa e areia) internamente ao reator simulado

Contudo, esse fenômeno se demonstra bem representado por meio da variação de densidade das partículas, visualizado por meio da opacidade na *freeboard* do reator, em 0,1 s e 20 s da Fig. 4.32.

A avaliação qualitativa de espécies químicas gasosas produzidas pelo processo termoquímico do reator em questão também teve boa correlação. Qi et al. (2019) apresentaram as espécies ao fim do processo (20 s) de forma individualizada para H_2 , CO, CO_2 e CH_4 (Fig. 4.33). As imagens são importantes para determinação das zonas de reações, em que se identifica a formação dos gases ainda na região do leito de partículas sólidas de biomassa. Os autores ainda ressaltam que a formação de determinadas espécies se intensifica ao longo da *freeboard* do reator, devido a maior energia térmica incidente. Portanto, a depender da composição química do syngas objetivada, esses resultados podem auxiliar na determinação da altura de *freeboard* do reator, definindo o tempo de residência de determinadas reações. O mesmo padrão de formação gasosa foi obtido na modelagem desenvolvida no presente trabalho (Fig. 4.34), com a diferença de que as espécies produtos foram somadas na visualização demonstrada.

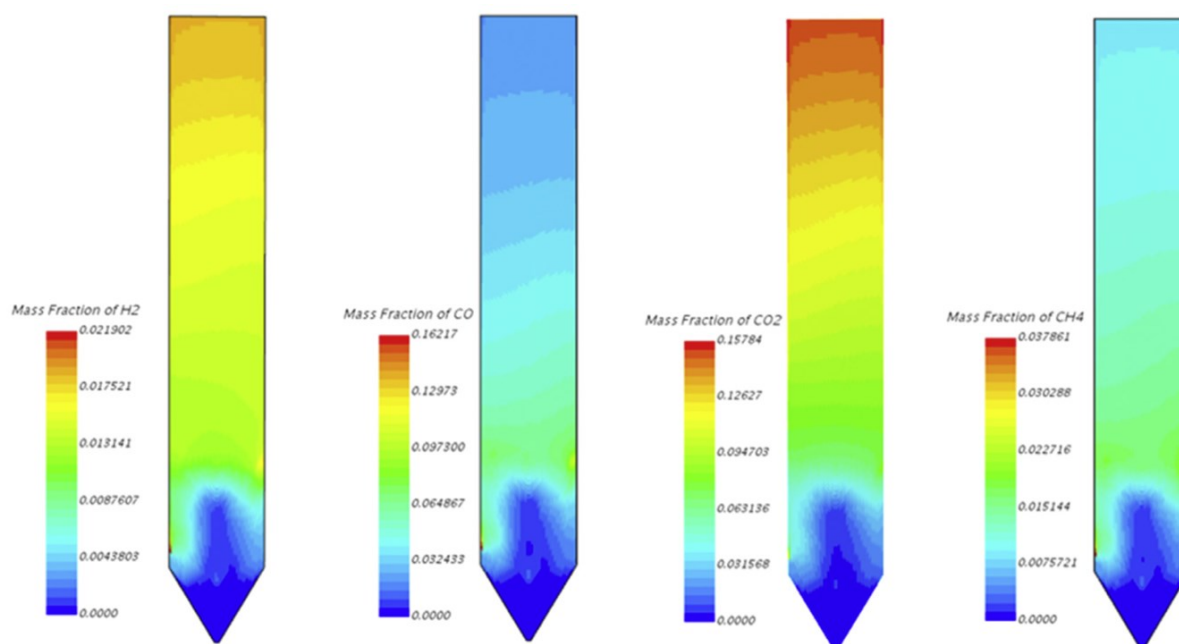


Figura 4.33 – Distribuição de espécies gasosas do gás de síntese produzido, aos 20 s de tempo físico. Adaptado de Qi et al. (2019)

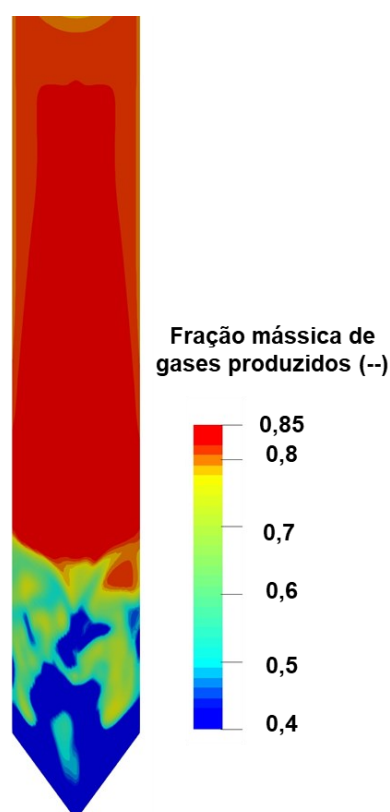


Figura 4.34 – Distribuição de gases em fração mássica ponderada de todas as espécies produzidas no processo

Tais resultados compõem a validação termoquímica do presente modelo, sobretudo considerando as diferentes abordagens utilizadas (euleriana ou lagrangeana) com relação aos resultados da literatura acadêmica.

4.1.3.3. Validação Experimental: Comparativo de Composição do Syngas

A validação final da metodologia que compõe a modelagem do Reator da Planta Piloto de Mauá-SP consiste na comparação do gás de síntese obtido na planta experimental e por simulações quando da gaseificação de CDRSU nas mesmas condições de operação. Conforme descrito na Seção 3.1 e graficamente apresentado na Fig. 3.7, o balanço de massa – referente ao fluxo de ar insuflado no reator, vazão mássica de biomassa injetada, produção de cinzas e carvão e liberação de gás de síntese pelo *outlet* – foi verificado com o reator do modelo configurado para operar em tais condições. Esse balanço será demonstrado na Seção 4.2, de resultados de simulação do reator em operação contínua.

Para o correto desenvolvimento do modelo termoquímico, a devolatilização, reações heterogêneas e homogêneas foram implementadas de forma conjunta e o controle das taxas

de reações foram realizados de forma iterativa avaliando-se a competitividade desses fenômenos mediante a atmosfera local propícia para cada reação. Após esse ajuste e verificação, com a finalidade de controlar as taxas de consumo/produção de espécies químicas, também se verificou, principalmente, o balanço de espécies. A verificação dos balanços foi detalhada na Seção 4.2.

A comparação da composição do syngas obtidos experimentalmente e por simulações foi resumida na Tab. 4.3. Verifica-se que, nas mesmas condições de operação, o erro máximo obtido foi de 3,2%, referente a fração volumétrica aumentada espécie química nitrogênio (N_2). Em termos do PCI obtido, o erro foi menor que 1%, compensado pela redução da fração volumétrica de hidrogênio (H_2). Na Fig. 4.35, a espécie química do N_2 foi omitida do histograma para melhor visualização dos componentes de interesse do gás de síntese. Tais resultados se demonstraram satisfatórios e apresentaram boa correlação com a composição do syngas obtida experimentalmente no reator da Planta Piloto de Mauá-SP.

A variação nas frações obtidas ou o erro percentual pode ser aprimorado com a inclusão de mais séries experimentais na Planta Piloto de Mauá-SP, a fim de se ter melhores avaliações da termoquímica envolvida e aprimoramento do modelo computacional. A dinâmica interna do reator em operação é significativamente alterada por diversos fatores inerentes ao processo da gaseificação experimental, portanto, o modelo CFD desenvolvido pode ser ajustado para cada tipo de operação.

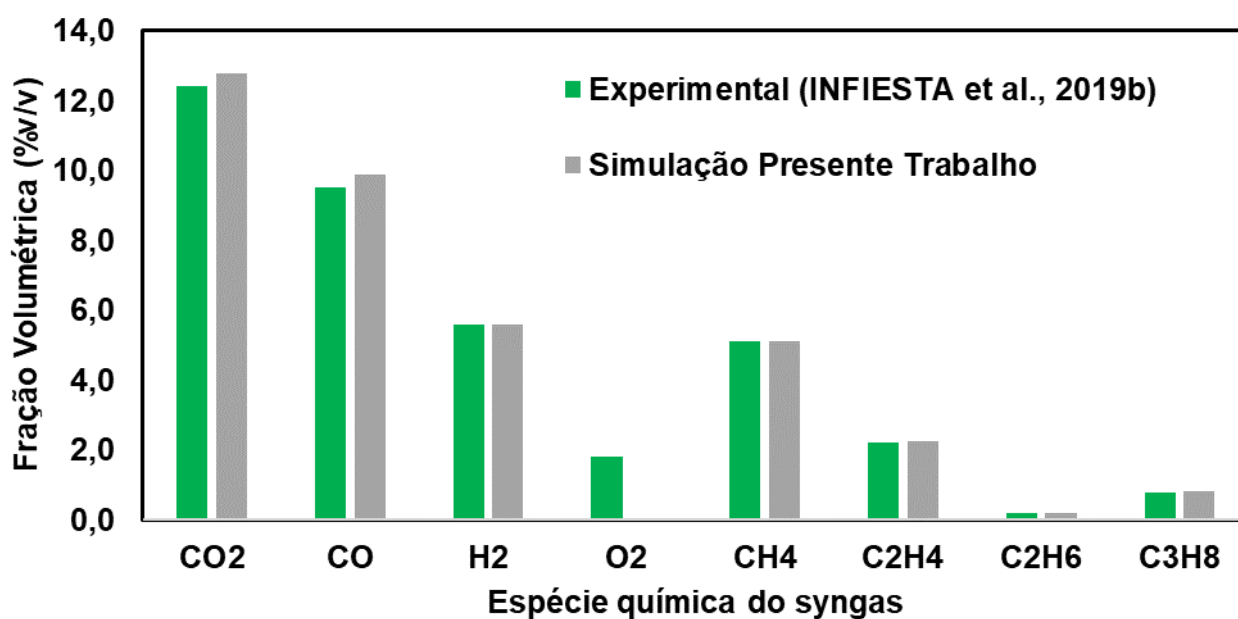


Figura 4.35 - Histograma comparativo de resultados experimentais e de simulação referente às espécies químicas de interesse presentes no gás de síntese

Tabela 4.3 - Composição volumétrica (% v/v) e Poder Calorífico Inferior (MJ/kg) do gás de síntese produzido na planta piloto de gaseificação do CDRSU (Gás coletado após sistema de lavagem do gás) e obtido por simulações da gaseificação de CDRSU

Espécie química	Syngas Planta Piloto de Mauá-SP (%v/v)	Syngas Obtido pelas simulações (%v/v)	Erro Absoluto (--)
Vapor d'água (H ₂ O)	NI	0,1	-0,1
Dióxido de Carbono (CO ₂)	12.4 ± 0.8	12,8	-0,4%
Monóxido de Carbono (CO)	9.5 ± 0.8	9,9	-0,4%
Hidrogênio (H ₂)	5.6 ± 0.8	5,6	0,0%
Oxigênio (O ₂)	1.8 ± 0.6	0,0	1,8%
Metano (CH ₄)	5.1 ± 0.5	5,1	0,0%
Nitrogênio (N ₂)	60.1 ± 1.1	63,3	-3,2%
Eteno (C ₂ H ₄)	2.2 ± 0.2	2,3	-0,1%
Etano (C ₂ H ₆)	0.2 ± 0.06	0,2	0,0%
Propano (C ₃ H ₈)	0.8 ± 0.07	0,8	0,0%
Etino (C ₂ H ₂)	NI	--	--
Propadieno (C ₃ H ₄)	NI	--	--
Propino (C ₃ H ₄)	NI	--	--
Propeno (C ₃ H ₆)	NI	--	--
Iso-Butano (C ₄ H ₁₀)	< 0.01 ± 0.00	--	--
<i>n</i> -Butano (C ₄ H ₁₀)	0.08 ± 0.007	--	--
<i>iso</i> -Pentano (C ₅ H ₁₂)	< 0.01 ± 0.00	--	--
<i>n</i> -Pentano (C ₅ H ₁₂)	< 0.01 ± 0.00	--	--
<i>n</i> -Hexano (C ₆ H ₁₄)	< 0.01 ± 0.00	--	--
PCI (MJ/kg)	4,6 ± 0,3	4,900*	0,3%

* Calculado

4.2. Resultados

O enfoque desta seção foi nos resultados obtidos pelas simulações com as configurações do reator em operação contínua, de mesmas condições da operação contínua do reator da Planta Piloto de Mauá-SP.

Uma das etapas que demandou grande atenção foi o de ajustes ao modelo referente aos parâmetros de simulações, condições de contorno, parâmetros numéricos, formato dos volumes finitos considerado, número de células da malha, dentre outros. Observou-se que alguns submodelos não foram capazes ou eficientes quando das simulações com o reator de larga escala. Assim, as simulações foram conduzidas por meio de vários testes até a seleção adequada dos submodelos descritos no Capítulo III. Tais técnicas permitiram a boa convergência das simulações.

Um dos parâmetros que é bastante utilizado para avaliar a convergência dos campos calculados ao longo da simulação é o Resíduo Inicial. Esse valor é relativamente alto (entre $1,00 \times 10^{-1}$ a $1,00 \times 10^{-4}$) no início das iterações e atinge valores adequados (entre $1,00 \times 10^{-8}$ a $1,00 \times 10^{-11}$) ao fim das iterações a cada passo de tempo. Contudo, o resíduo inicial é avaliado ao longo de toda a simulação dentro de um intervalo tolerável dessa variável a fim de verificar a ocorrência de instabilidades e oscilações de grande amplitude. A Fig. 4.36 demonstra a convergência numérica das simulações em termos dos resíduos numéricos dos campos de frações mássicas das fases, espécies e energia. Maiores informações sobre a solução numérica do sistema de equações foram compiladas no APÊNDICE III, mais especificamente no arquivo *fvSolution*. Os resíduos são os desequilíbrios da solução, que implicam na precisão numérica. Os valores desses parâmetros devem ser os menores possíveis, indicando boa convergência numérica do modelo. Assim, seus gráficos ao longo do tempo físico de simulação não devem conter picos e grandes variações, de modo a garantir a confiabilidade dos métodos aplicados, como observado nos gráficos a seguir, que indicam boa convergência do modelo ao longo das simulações.

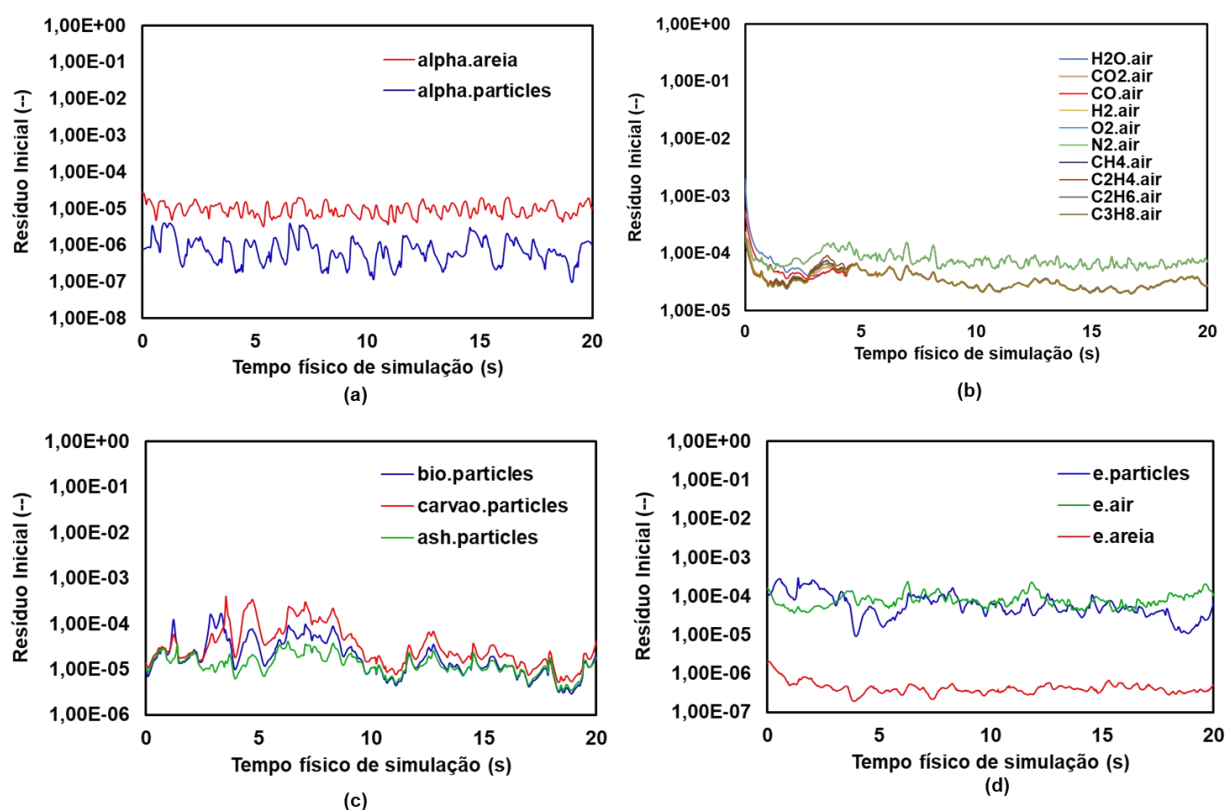


Figura 4.36 – Resíduo Inicial referente à (a) fração mássica das fases sólidas, (b) fração mássica das espécies da fase biomassa, (c) frações mássicas das espécies gasosas e (d) energia interna das fases envolvidas ao longo da simulação

Após esse trabalho de convergência numérica do sistema, o objetivou-se verificar a convergência da interpretação física da solução e determinar a influência da malha aos resultados, conforme demonstração a seguir.

4.2.1. Convergência e Sensibilidade de malha

Assim como ressaltado na Seção 4.1, de validação do modelo, notou-se que a estabilização fluidodinâmica do modelo precede a estabilidade termoquímica ao longo do tempo físico de simulação. Portanto, a convergência de malha foi avaliada para ambos os fenômenos.

Os primeiros testes de simulação envolveram a malha geral do reator (Fig. 4.37), com refinamento grosseiro, contendo apenas 11.760 volumes finitos. O formato de células **hexaédricas** foi selecionado por atribuir maior grau de convergência com relação a células prismáticas, piramidais e tetraédricas testadas.

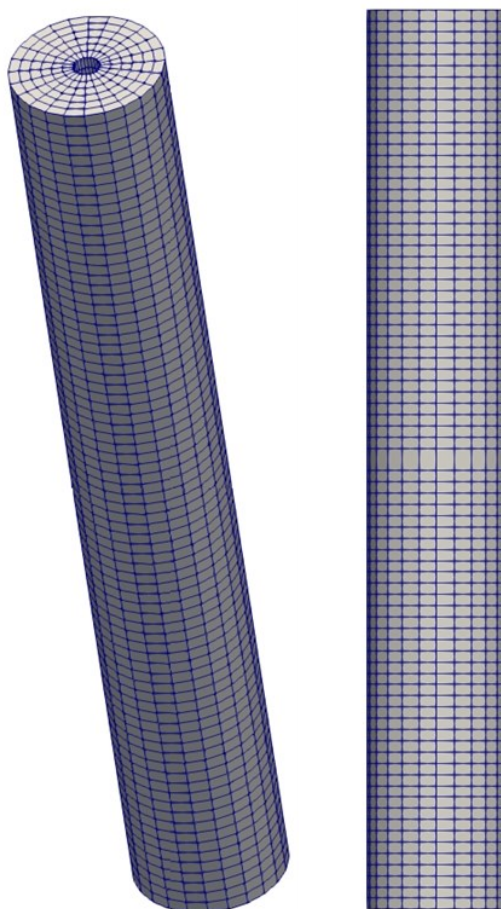


Figura 4.37 – Malha grosseira com 11.760 células, utilizada nas simulações testes e para análise de convergência de malha

Também foi feito grande uso de uma malha de geometria simetrizada do reator (Fig. 4.38), permitindo aumentar-se as divisões e o número de elementos geométricos, contendo 46.080 células, sem perder a essência dos fenômenos físico-químicos do processo de larga escala.

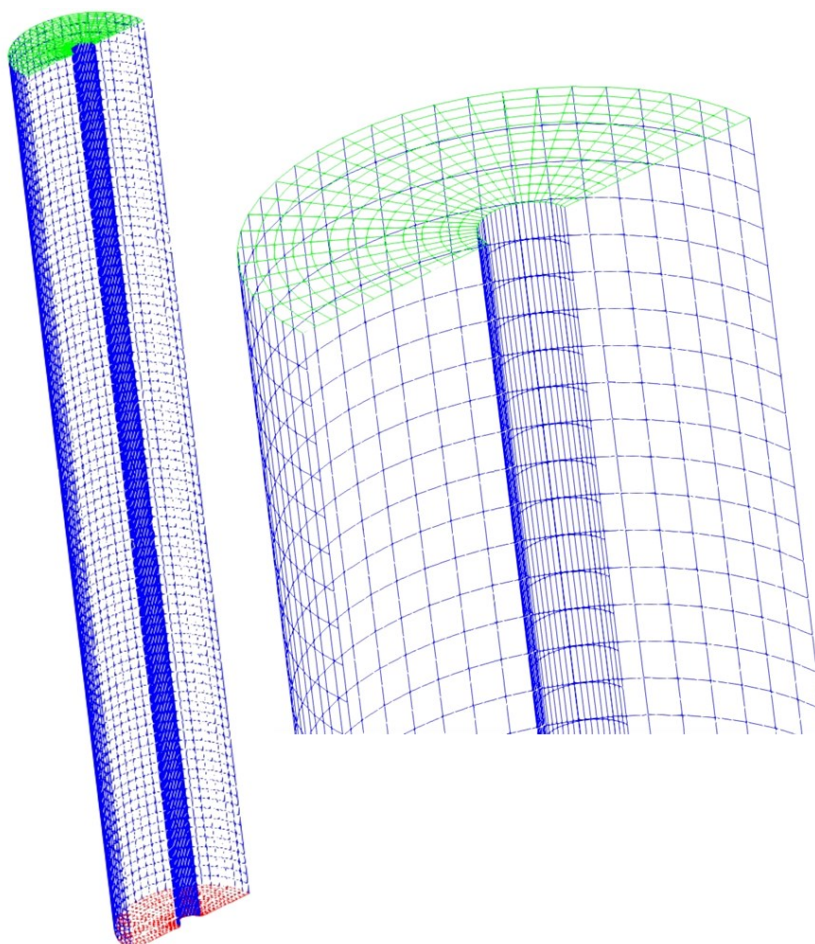


Figura 4.38 – Malha simétrica de refinamento intermediário, com 46.080 células, e indicação das suas superfícies de controle: *inlet* (vermelho) e *outlet* (verde)

As Fig. 4.39 e 4.40 demonstram as malhas com alto grau de refinamento utilizadas no presente trabalho nesta análise de sensibilidade de malha. Por se tratar de uma geometria de larga escala, observa-se que, mesmo na malha com altíssimo grau de refinamento (Fig. 4.40), contendo 1.037.232 células, as dimensões de suas arestas variam entre 0,005 (0,5 cm) e 0,03 m (3 cm), que podem ser consideradas de grandes dimensões em determinadas simulações CFD a depender do tipo de escoamento. Porém, nas simulações do presente trabalho, a utilização dessa malha, com grande quantidade de elementos, se demonstrou mais que satisfatória em termos de resultados; apesar de não ser a malha mais viável em termos do custo computacional.

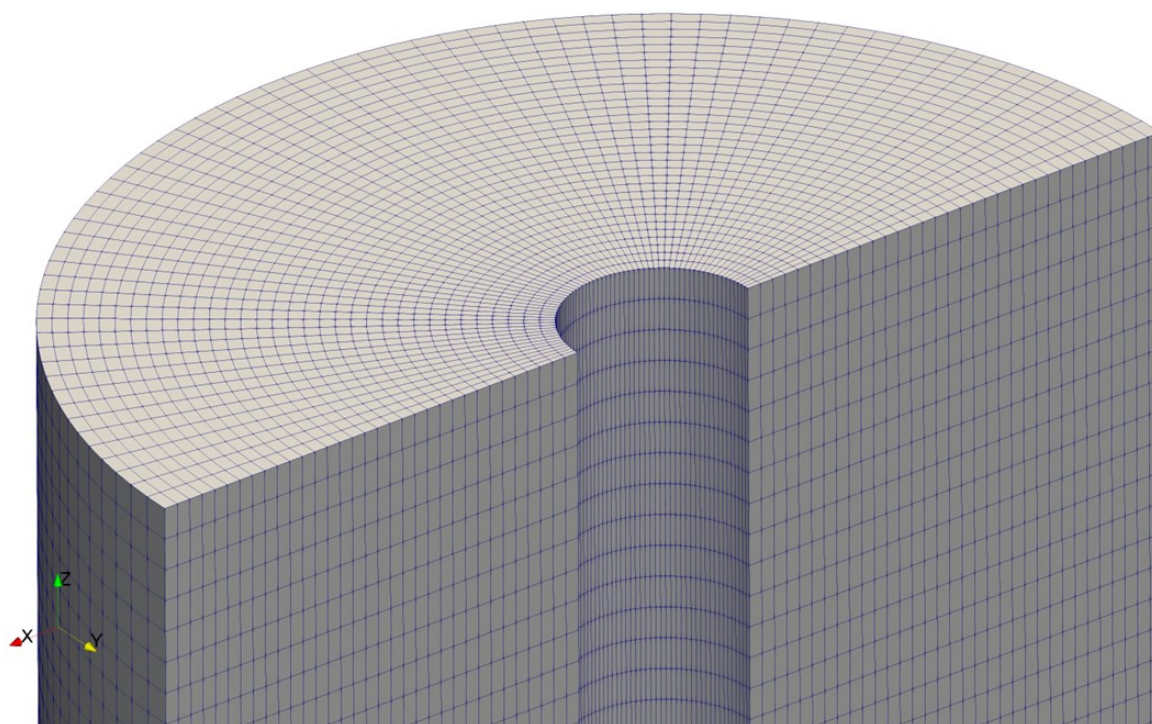


Figura 4.39 - Malha simétrica de alto refinamento, com 503.118 células

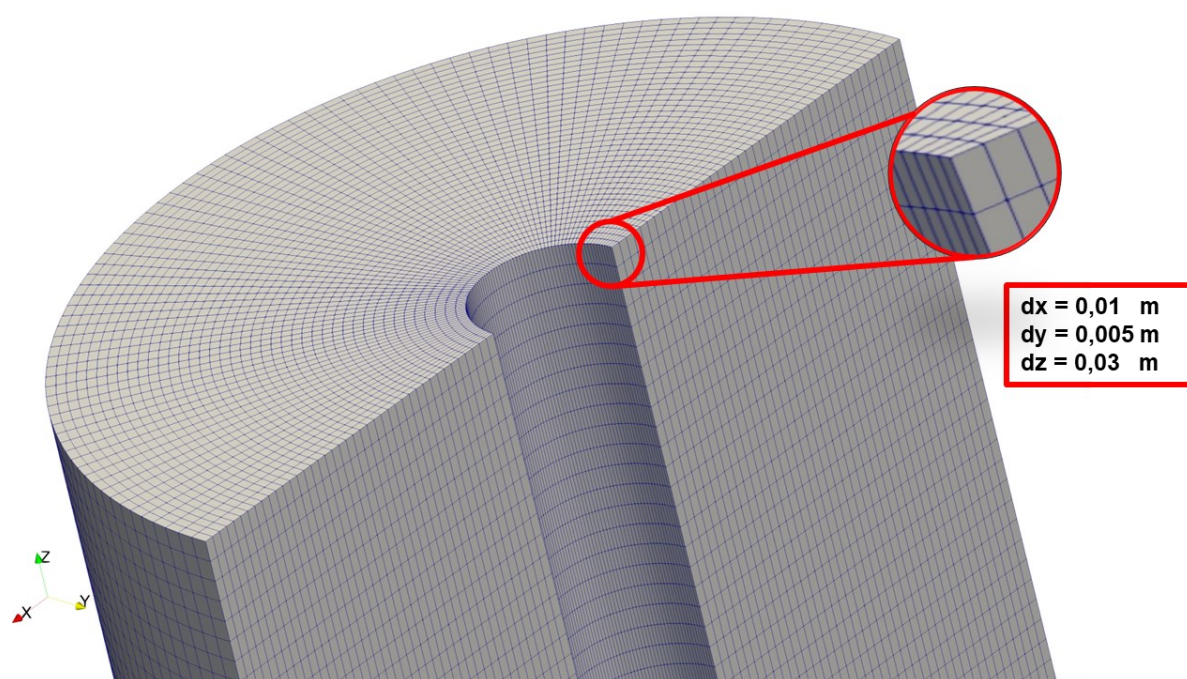


Figura 4.40 - Malha simétrica de altíssimo refinamento, com 1.037.232 células, e indicação das dimensões das arestas das menores células

Observou-se que quanto maior o número de células da malha, menor é o tempo físico de simulação necessário para a estabilização da pressão (média) de insuflamento induzida na área superfície *inlet* de controle (Fig. 4.41); até sua estabilização com malhas com número de células maiores ou iguais a 112.000.

Já para a avaliação da convergência de malha com relação aos atributos da termoquímica do processo, utilizou-se da composição do gás de síntese liberado em função do número de elementos da malha.

A seleção da malha deve ter número de elementos suficientes para abranger tanto o fenômeno da fluidodinâmica quando da termoquímica, que atuam simultaneamente no modelo. Portanto, priorizando-se menor custo computacional possível, a malha selecionada para as simulações definitivas em operação contínua do reator foi de 112.000 elementos. A seleção adequada da malha a ser utilizada na elaboração dos resultados do presente trabalho se deu com o número mínimo de células que permite a convergência de malha para ambos os fenômenos simultaneamente. Nesse sentido, a malha com 112.000 células hexaédricas foi selecionada neste estudo de sensibilidade de malha.

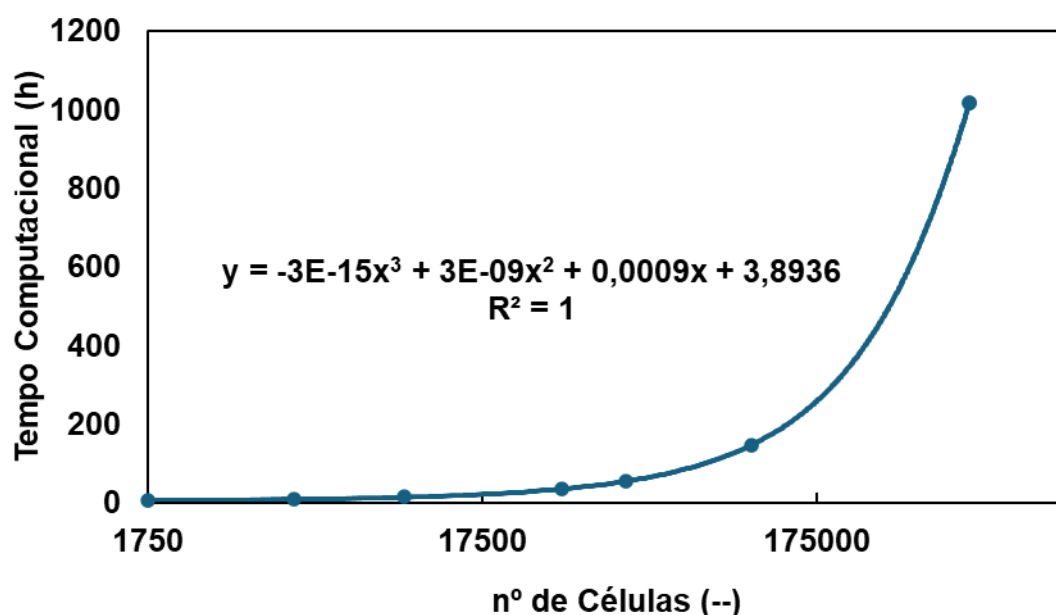


Figura 4.41 – Tempo computacional em função do número de células do modelo

4.2.2. Balanços de Massa e de Espécies

A verificação do balanço de massa e de espécies do modelo foi feita por meio de cálculos implementados ao software para aquisição das informações em detalhes a respeito dos fluxos (ϕ_{inlet} ou ϕ_{outlet}) sobre as superfícies de controle de entrada (*inlet*) e saída

(outlet) do reator, além do somatório da diferença de massa instantânea ($m_{i,t}$) com a inicial ($m_{i,0}$) com relação a todos volumes finitos do domínio do reator.

Assim, para cada espécie (i) do modelo, foram calculadas as seguintes variáveis no tempo:

$$m_{i,0} = \sum_{\substack{\text{volumes} \\ \text{internos}}} Y_{i,k} \alpha_k \rho_k \quad (4.1)$$

$$m_{i,t} = \sum_{\substack{\text{volumes} \\ \text{internos}}} Y_{i,k} \alpha_k \rho_k \quad (4.2)$$

$$\dot{m}_i^{IN} = \sum_{\substack{\text{faces} \\ \text{inlet}}} Y_{i,k} \alpha_k \rho_k \phi_{inlet} \quad (4.3)$$

$$\dot{m}_i^{OUT} = \sum_{\substack{\text{faces} \\ \text{outlet}}} Y_{i,k} \alpha_k \rho_k \phi_{outlet} \quad (4.4)$$

que compuseram equação de balanço da i -ésima espécie de interesse avaliada:

$$\dot{m}_i = \pm(m_{i,0} - m_{i,f}) + \dot{m}_i^{IN} - \dot{m}_i^{OUT} \quad (4.5)$$

Esse balanço foi feito de forma individualizada para cada reação e de forma geral, conforme demonstrado na Tab. 4.4.

Tabela 4.4 – Variáveis de massa a serem calculadas conforme cada reação química avaliada

Reação	Reagente(s)	Produto(s)
Devolatilização	$\dot{m}_{bio}$	$\dot{m}_{H_2O} + \dot{m}_{CO_2} + \dot{m}_{CO} + \dot{m}_{CH_4} + \dot{m}_{H_2} + \dot{m}_C + \dot{m}_{C_2H_4} + \dot{m}_{C_2H_6} + \dot{m}_{C_2H_8}$
Reforming of Char	$\dot{m}_C + \dot{m}_{H_2O}$	$\dot{m}_{CO_2} + \dot{m}_{H_2}$
Boudouard	$\dot{m}_C + \dot{m}_{CO_2}$	$2\dot{m}_{CO}$
Methanation	$\dot{m}_C + 2\dot{m}_{H_2}$	$\dot{m}_{CH_4}$
Reação Water-gas shift	$\dot{m}_{CO} + \dot{m}_{H_2O}$	$\dot{m}_{CO_2} + \dot{m}_{H_2}$

<i>Reverse Water-gas shift</i>	$\dot{m}_{CO_2} + \dot{m}_{H_2}$	$\dot{m}_{CO} + \dot{m}_{H_2O}$
<i>Methane- Steam Reforming</i>	$\dot{m}_{CO} + 3\dot{m}_{H_2}$	$\dot{m}_{CH_4} + \dot{m}_{H_2O}$

De forma iterativa, os coeficientes molares das reações (n_i), da Eq. (3.45), são ajustados e a verificação do balanço de espécies é concluída quando se obtém a igualdade das reações ativas:

$$\dot{m}_{reagentes} = \dot{m}_{produtos} \quad (4.6)$$

E o balanço de massa também é verificado de forma análoga para as fases (k) envolvidas:

$$\dot{m}_k = \pm(m_{k,0} - m_{k,f}) + \dot{m}_k^{IN} - \dot{m}_k^{OUT} \quad (4.7)$$

A Eq. (4.7) resulta, em termos práticos e comparativos ao reator experimental da Planta Piloto, na seguinte equação:

$$\dot{m}_{CDRSU} + \dot{m}_{ar} + \dot{m}_{areia} = \dot{m}_{syngas} + \dot{m}_{cinzas} + \dot{m}_{carvao} \quad (4.8)$$

O balanço da Planta Piloto de Mauá-SP foi resumido na Tab. 4.5, apresentando erro relativo máximo de 1,94%, para a taxa de cinzas. Esse erro pode ser ainda menor considerando a variabilidade do processo industrial físico na planta. Contudo, foi considerado um valor razoável a fim de possibilitar a validação do presente modelo. Salienta-se ainda que o mesmo pode ser melhorado iterativamente à medida que forem obtidos outros resultados na experimentação física do reator.

Tabela 4.5 – Resumo do balanço de massa comparativo

Taxa	Reator Planta Piloto de Mauá-SP		Taxa Alvo (geometria simétrica ÷2)	Taxa líquida obtida	Erro Relativo (%)
$\dot{m}_{CDRSU}$	296 kg h ⁻¹	0,08222 kg s ⁻¹	0,04111 kg s ⁻¹	0,04185 kg s ⁻¹	-1,81%
$\dot{m}_{ar}$	488,4 kg h ⁻¹ @ 400 °C	0,13567 kg s ⁻¹	0,06783 kg s ⁻¹	CI	0%
$\dot{m}_{areia}$	NI	NI	N/A	N/A	N/A
$\dot{m}_{syngas}$	704,3 kg h ⁻¹ @ 800 °C	0,19564 kg s ⁻¹	0,09782 kg s ⁻¹	0,09879 kg s ⁻¹	-0,99%
$\dot{m}_{cinzas}^*$	79,96 kg h ⁻¹	0,02221 kg s ⁻¹	0,01111 kg s ⁻¹	0,01089 kg s ⁻¹	1,94%
$\dot{m}_{carvao}$	NI	NI	0,0 kg s ⁻¹	0,0 kg s ⁻¹	N/A
$\dot{m}_{cal}$	1,220 kg h ⁻¹	0,00034 kg s ⁻¹	N/A	N/A	N/A

* A taxa de extração de cinzas do Reator da Planta Piloto de Mauá-SP deve ser igual a taxa de cinzas produzidas em simulação.

CI – Condição Inicial configurada no software

NI – Não informado (dado não obtido durante experimentos)

Quanto aos resultados gráficos da taxa de variação mássica de biomassa, carvão (Fig. 4.42) e cinzas (Fig. 4.43), observa-se que, durante o tempo físico de simulação até 10 s, há variação na taxa de produção/consumo desses componentes. Após esse período, devido à estabilização da temperatura e taxas de reações, a taxa de variação mássica torna-se constante, ou mesmo nula, para o caso do carvão. Isso ocorre com esse componente pois há a compensação da produção de carvão com o seu consumo devido às reações heterogêneas em que o carvão atua como reagente na produção das espécies gasosas contendo carbono.

Em específico quanto ao componente de cinzas (Fig. 4.43), não há essa compensação por não haver reações envolvendo esse componente na formação de outras espécies. Sua taxa torna-se constante, uma vez que não foi implementado nesse caso a extração de cinzas do reator.

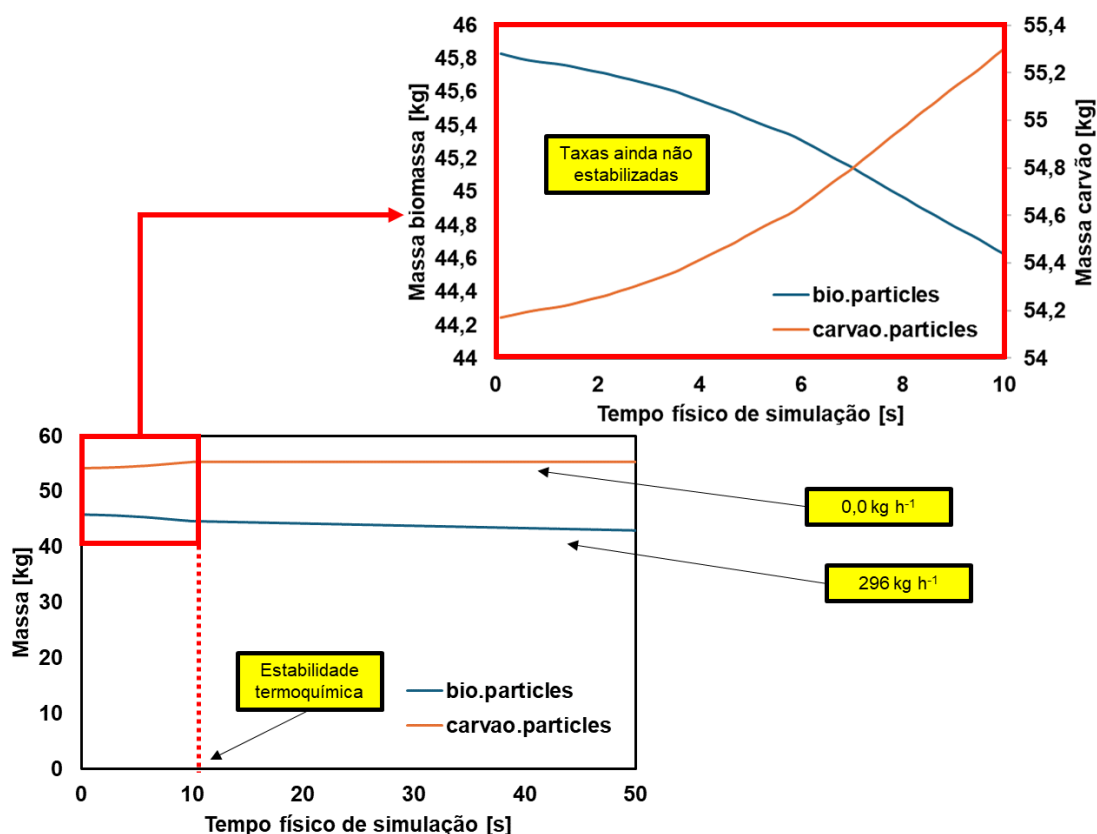


Figura 4.42 – Massa dos componentes biomassa e carvão da fase de CDRSU ao longo do tempo físico de simulação, sem injeção de biomassa. Informações da estabilização e taxas de consumo

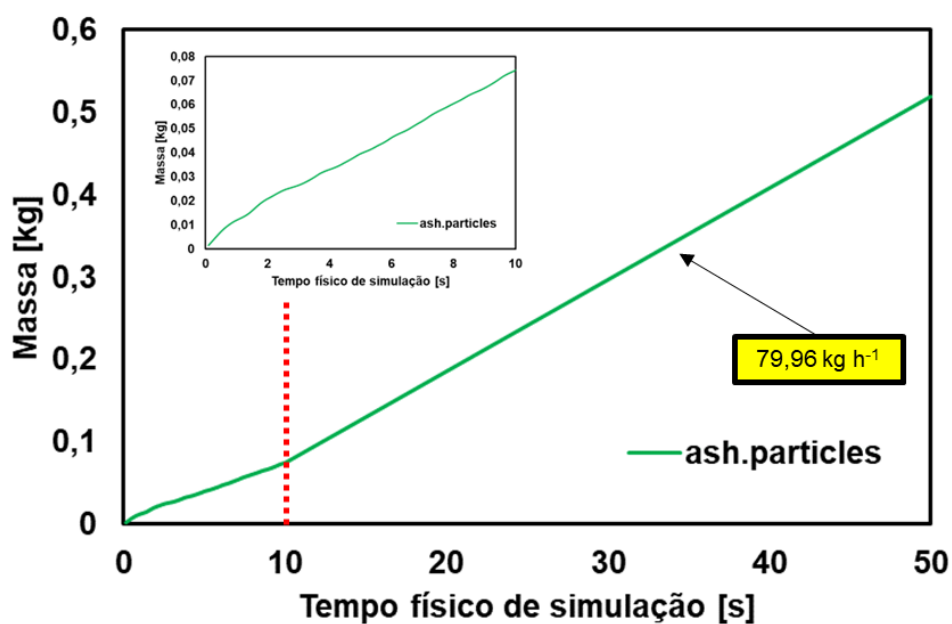


Figura 4.43 – Massa do componente de cinzas da fase de CDRSU ao longo do tempo físico de simulação, sem extração. Informações da estabilização e taxas de consumo

4.2.3. Caracterização do Gás de Síntese

Adicionalmente às informações apresentadas na Seção 4.1.3, observou-se que parte das variações de fração mássica de determinadas espécies químicas se dá devido à estabilização fluidodinâmica do sistema multifásico, que afeta as trocas térmicas entre fases sólidas e gasosas e à estabilização da temperatura, que influencia significativamente nas taxas das reações químicas implementadas. Além do fato de o sistema estar inicialmente preenchido de ar (contendo 78% de gás nitrogênio e 22% de gás oxigênio), o que leva ao excesso de comburente nas reações oxidativas, intensificando sua ocorrência. Esse efeito não é desejado à modelagem e poderia ter sido corrigido com a implementação de 100% gás nitrogênio ou outro gás inerte. Por isso a importância da definição dos tempos de estabilização descritos nas seções anteriores para correta coleta de dados.

Por meio da Eq. (3.55) foi possível também avaliar a composição do syngas obtido a fim de se identificar de forma ponderada a(s) espécie(s) mais influentes no PCI do gás. O maior interesse é o de se obter o syngas com o maior PCI possível, que indicaria melhor aproveitamento energético da biomassa CDRSU, e identificar os fatores que levam à otimização da composição desse combustível.

$$PCI_{syngas} = LHV_{syngas} = \frac{|Q|}{\sum_i n_i MM_i} \quad (4.9)$$

O poder calorífico inferior (PCI) do gás de síntese obtido (Tab. 4.3) representa em termos em torno de 10 em termos de energia de gases típicos combustíveis, como o Gás Liquefeito de Petróleo (GLP) e Gás Natural (GN) de PCI de 45,5 MJ kg⁻¹ e 48,6 MJ kg⁻¹ (BORELLI et al., 2023), respectivamente. Contudo, o objetivo da recuperação energética de resíduos demonstra-se conveniente e a geração de energia térmica por meio da combustão ratifica a utilidade e o potencial da tecnologia de gaseificação avaliada no presente trabalho.

Uma vez que o ar, agente gaseificante utilizado, é rico em gás nitrogênio, sempre haverá o inconveniente de perda de energia térmica quando do aquecimento desse gás inerte e o de syngas obtido ter abundância dele, reduzindo muito seu valor do PCI. Por essa razão que, em diversos trabalhos da literatura acadêmica, os desenvolvedores utilizam o vapor d'água para essa função. Ele é capaz de fornecer tanto o gás oxigênio (O₂) quanto o gás hidrogênio (H₂), que são espécies químicas de grande interesse no processo e para os produtos.



Figura 4.44 – *Flare* para a queima controlada do gás de síntese produzido na Planta Piloto de Mauá-SP

4.3. O escoamento de larga escala

A maior contribuição do presente trabalho se dá na caracterização do escoamento do reator de larga escala da Planta Piloto de Mauá-SP para gaseificação de CDRSU. Os fenômenos envolvidos e suas características determinantes não são de amplo domínio pela literatura acadêmica e na indústria. Por essa razão, ainda há carência de soluções viáveis a nível comercial para a gaseificação desse tipo de resíduo em leito fluidizado.

Para a caracterização do escoamento de larga escala do reator simulado, a primeira indicação é quanto ao Regime de escoamento. Com os dados experimentais do reator da Planta Piloto de Mauá-SP em sua operação contínua, foi possível configurar no modelo de simulação os parâmetros iniciais e condições de contorno do problema, de acordo as Tab. 3.11, 3.12 e 4.5.

Conforme evidenciado na Seção 4.1.2, o regime de escoamento predominante obtido por simulações foi de Leito Fluidizado Borbulhante. Essa constatação também foi concebida por meio das vídeo-capturas apresentadas naquela seção. Nem sempre a obtenção de imagens nesse tipo de reator é possível, portanto, o presente modelo tem grande utilidade na caracterização do escoamento, sem a necessidade de execução de experimentos e custos financeiros.

A Fig. 4.45 caracteriza o escoamento de larga escala obtido em termos da fração mássica das fases gasosa e sólidas (conjuntamente) presentes no modelo. Essa variável permite definir a altura de leito fluidizado, determinando, assim, o local em que haveria maior transferência de energia térmica no reator; além de ser a região que vai conter as partículas mais pesadas de biomassa em reação. Trata-se, portanto, da zona do leito fluidizado onde ocorrerá a maior parte das reações de degradação térmica e craqueamento para liberação de

gases (devolatilização). São reações que demandam maior tempo de residência e maior energia térmica. À medida que as partículas de biomassa se dividem em partes menores, ou se tornando mais porosas, sua densidade diminui e alcança maior altura no leito fluidizado. Nessa ocasião, seu comportamento será oscilatório até que seja completamente convertida em gases, destacando-se do leito fluidizado e ascende ao longo da *freeboard* do reator.

Já na Fig. 4.46, foi feita a identificação separadamente da fração mássica de biomassa e de areia com a finalidade de apresentar as regiões de maior permanência da biomassa, observadas pela maior fração mássica de fase sólida. Essa informação permite inferir sobre o melhor ponto para se injetar a biomassa ou mesmo definir a quantidade de areia e, conseqüentemente, a altura do leito fluidizado. Esse controle de quantidade de material de leito (areia) e ponto de injeção de biomassa é altamente dependente do tamanho das partículas de biomassa a ser degradada termicamente e da massa específica dos materiais contidos na biomassa. Portanto, maior quantidade de material de leito seria necessária para aumentar o tempo de residência da biomassa no interior do leito fluidizado em contato com o agente de inércia térmica de alta capacidade térmica, função realizada pela areia. Evidentemente, o aumento do material de leito ocasionaria aumento da pressão de insuflamento necessária, afetando outras características do regime de escoamento; cabendo uma análise casual mais detalhada.

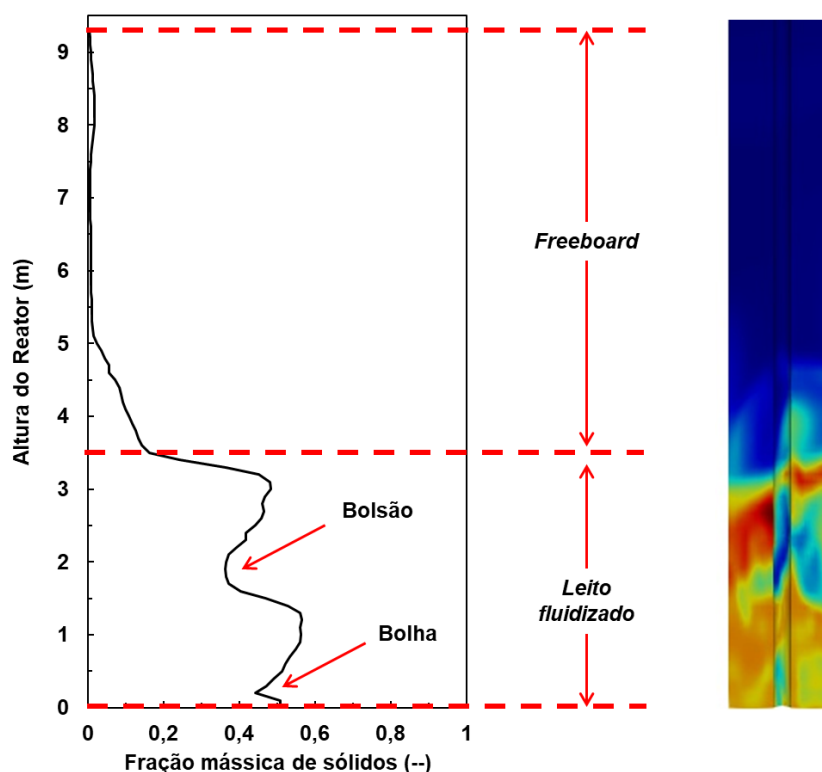


Figura 4.45 – Distribuição de particulado (biomassa e areia) ao longo da altura (eixo z) do reator

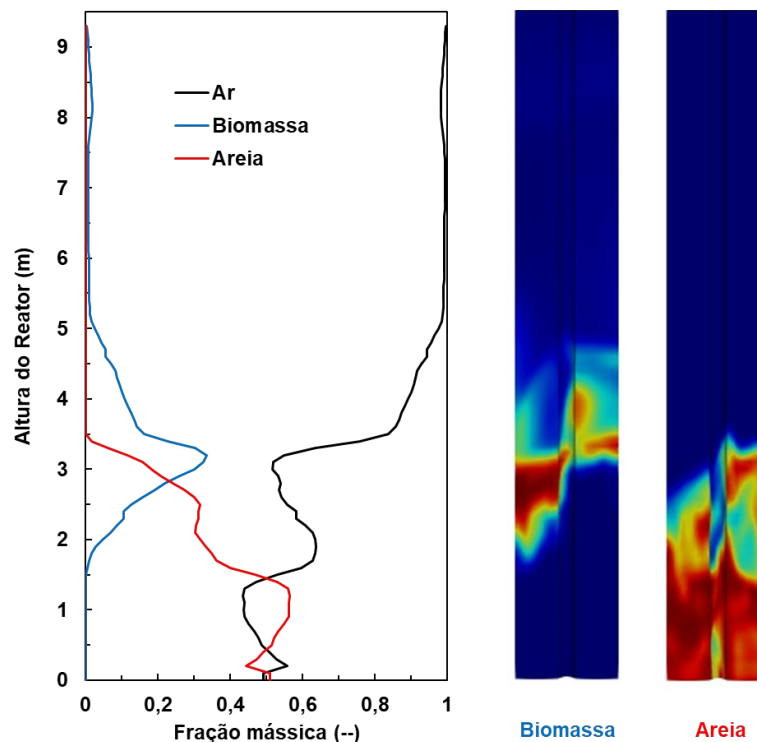


Figura 4.46 – Fração mássica de ar, biomassa e areia ao longo da altura (eixo z) do reator ao fim da simulação

Nesta seção buscou-se, ainda, apresentar características do gaseificador de larga escala que não poderiam ser obtidas por experimentos físicos, devido às altas velocidades atingidas em determinadas seções e a impossibilidade de se medir o teor de cada espécie química localmente ao longo do escoamento.

Os módulos das velocidades médias obtidas pelas simulações do interior do reator são em torno de $1,5 \text{ m s}^{-1}$, consistentes com a velocidade de insuflamento de ar na entrada do reator. Em testes de simulação realizados com a geometria de entrada do ciclone implementada, essas velocidades alcançam módulos em torno de 1000 rad s^{-1} (Fig. 4.47), devido à redução de área para o fluxo de gases.

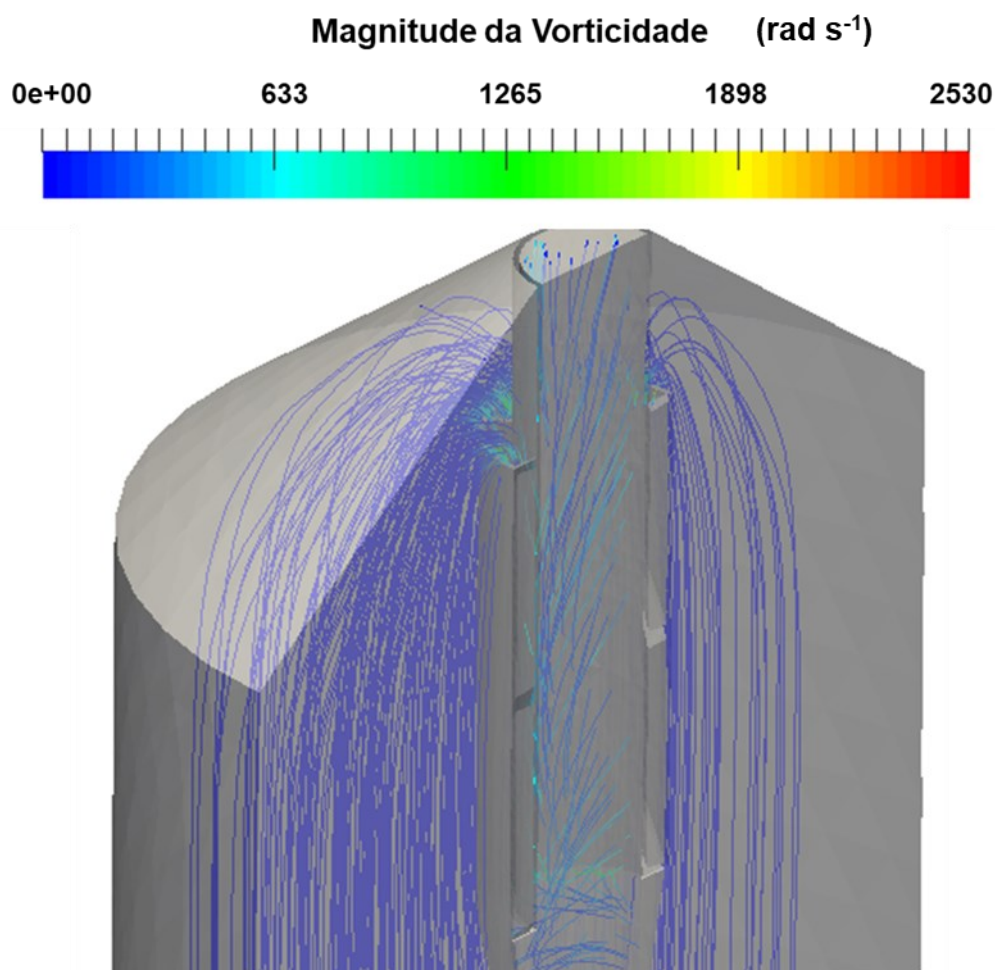


Figura 4.47 – Magnitude da vorticidade e linhas de corrente na entrada do ciclone do reator

Conforme brevemente explanado na Seção 3.4.1, essa geometria foi suprimida no presente modelo uma vez que não afetam significativamente as reações químicas, devido ao baixo tempo de residência percorrendo esse componente. Ademais, seria necessário um refinamento de malha exagerado para atender esse critério na região de estrangulamento do escoamento causada pelo ciclone a fim de se atender ao critério $Co \leq 1$, que indica condição necessária e suficiente para a convergência do método fluidodinâmico (OVADIA et al., 2021). O Número de *Courant* é definido pela Eq. (4.10) e (4.11):

$$Co = \Delta_t \tau \quad (4.10)$$

$$\tau = \frac{1}{2V} \sum_{faces} |\phi_i| \quad (4.11)$$

onde Δ_t é o tamanho do passo de tempo, τ é uma escala de tempo baseada nas escalas geométricas de fluxo local, V é o volume de célula, ϕ o fluxo volumétrico sobre a face do volume finito e $\sum_{faces}$ o somatório das faces. Esse parâmetro fornece uma medida da taxa na qual a informação é transportada sob a influência de um campo de fluxo e define, portanto, um fator limitante para o desempenho de esquemas numéricos. Dada a sua proporcionalidade direta com a velocidade, a condição supracitada só poderia ser atingida com uma célula com volume muito pequeno, inversamente proporcional à velocidade. Entretanto, caso o objetivo de estudos posteriores for a avaliação do componente de retenção de particulado sólido, o autor recomenda elevar-se significativamente o número de células da malha numérica e utilização da abordagem lagrangeana.

A Fig. 4.48 apresenta os valores médios e máximos do número de *Courant* ao longo do tempo físico de simulação. Esse adimensional é calculado para cada volume finito presente na malha. Portanto, essa figura apresenta os valores médios e máximos de todas as células ao longo da simulação. Na Fig. 4.49, com a distribuição do número de *Courant* e a magnitude da velocidade, verifica-se que esse adimensional é proporcional à velocidade do escoamento em cada célula, conforme esperado pela Eq. (4.11). Esse é mais um indicativo da convergência numérica e do modelo físico a respeito da fluidodinâmica de seu escoamento. Sua estabilização ocorre logo nos primeiros segundos, comportamento observado também pelo parâmetro da pressão de insuflamento do ar na superfície de entrada (*inlet*), demonstrado anteriormente na Fig. 4.16.

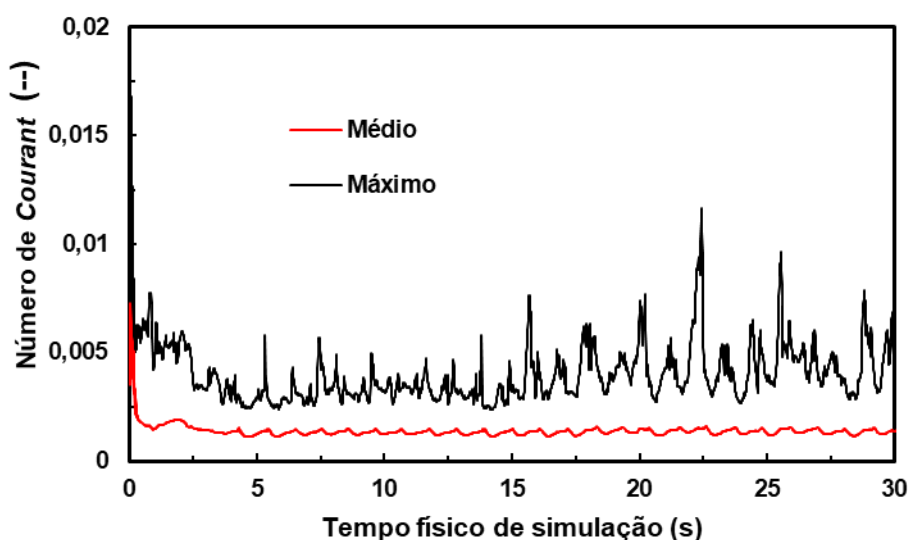


Figura 4.48 – Avaliação do Número de *Courant* (médio e máximo) ao longo do tempo físico de simulação

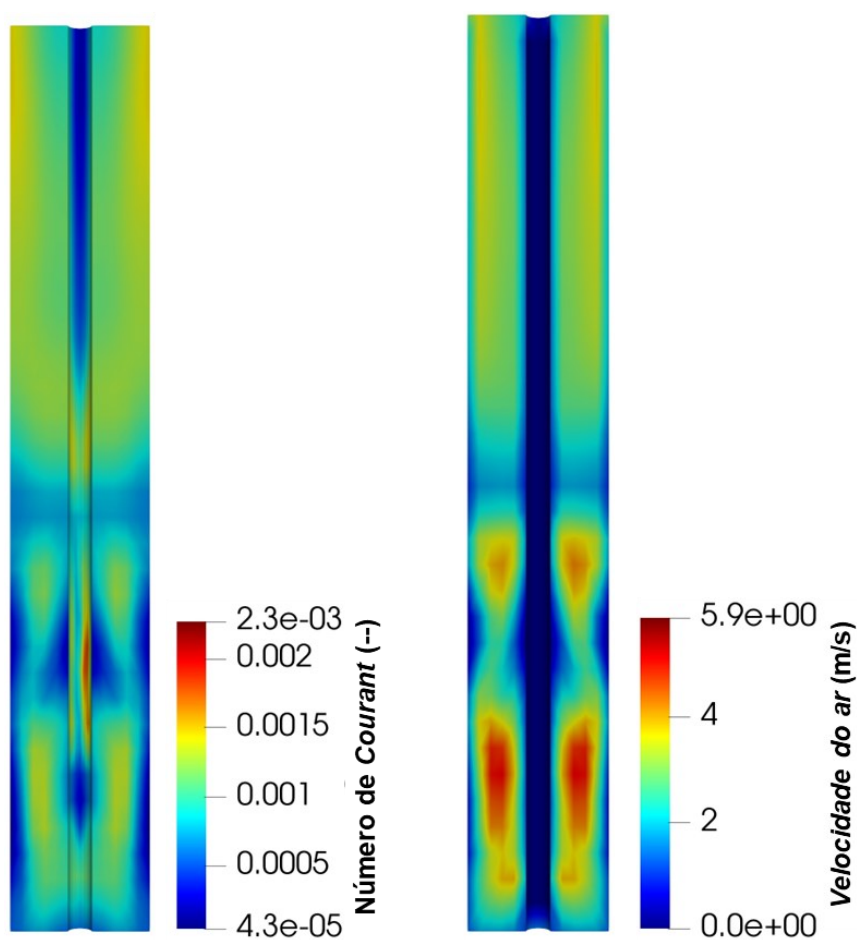


Figura 4.49 – Distribuição do Número de *Courant* e magnitude da Velocidade da fase gasosa no tempo final de simulação

Ainda em se tratando da fluidodinâmica interna do reator, a partir do cálculo de velocidades relativas entre fases (Fig. 4.50) também é possível inferir sobre a região de maior produção gasosa, i.e., onde houver a maior expansão do gás e diferença de velocidade ao longo do eixo de escoamento do reator (eixo Z).

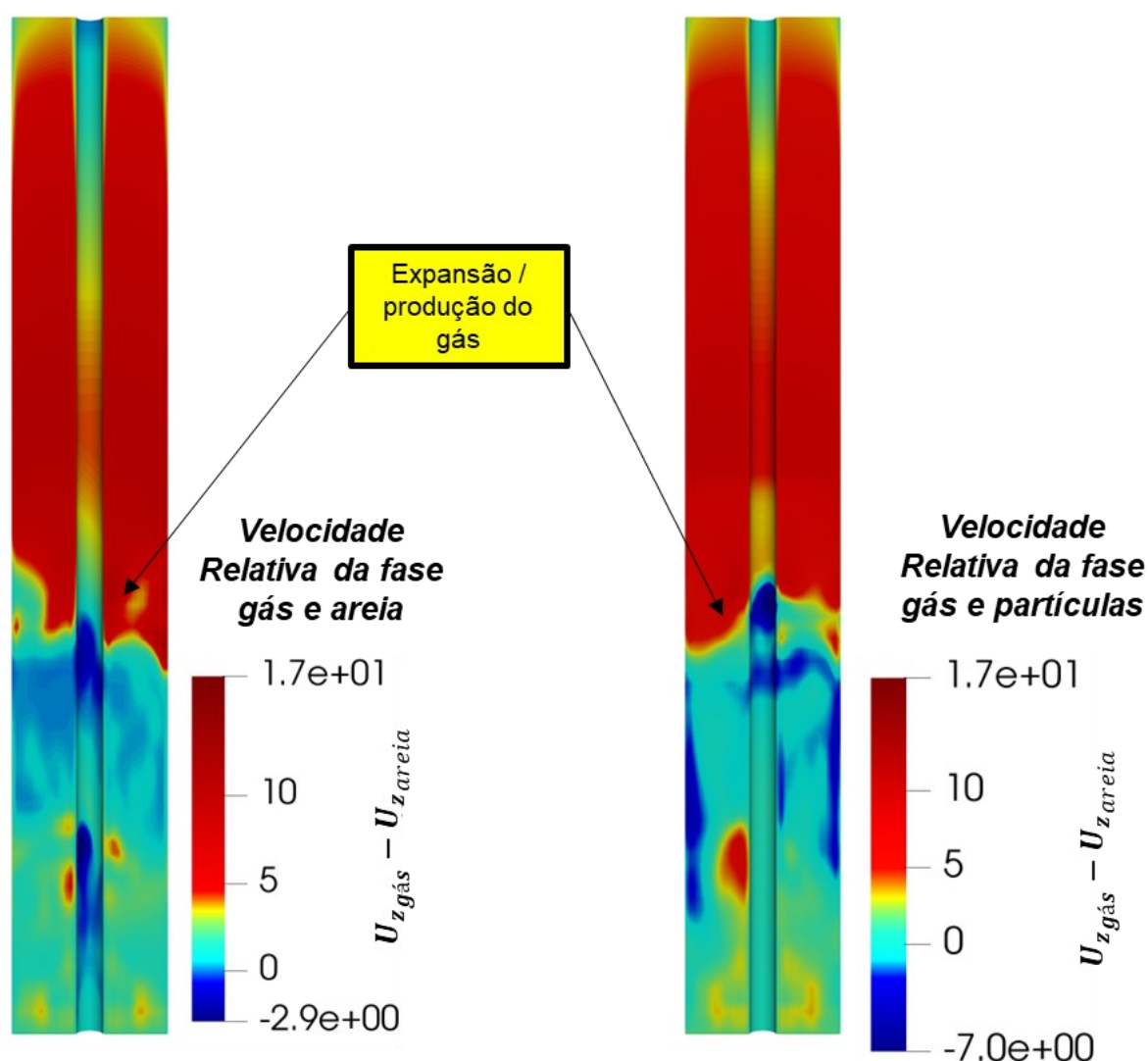


Figura 4.50 – Velocidade relativa entre fases em regime estabilizado de escoamento

Além dos atributos da fluidodinâmica e da convergência numérica do reator, ressalta-se ainda os aspectos referente à termoquímica do escoamento interno simulado. A depender dos reagentes presentes e da atmosfera local, pode-se determinar as zonas preferenciais de reações. Assim, os campos das variáveis de cada espécie química foram multiplicados a fim de se obter graficamente as regiões onde cada reação tende a ocorrer. Por exemplo, a zona de reação química de *Boudouard* ($C_{(s)} + CO_{2(g)} \rightarrow 2CO_{(g)}$) foi obtida com o seguinte cálculo de resultados:

- Reagentes:

$$\sum_{volumes} (\alpha_p \cdot \alpha_c) \cdot (\alpha_g \cdot \alpha_{CO_2}) \quad (4.12)$$

- Produtos:

$$\sum_{volumes} (\alpha_g \cdot \alpha_{CO}) \quad (4.13)$$

Assim obtendo-se a intercessão dos campos de fração mássica dos reagentes dessa reação, conforme as Fig. 4.51 a 4.53. O mesmo foi feito de forma análoga para os produtos e para os demais componentes das demais reações, sejam homogêneas ou heterogêneas.

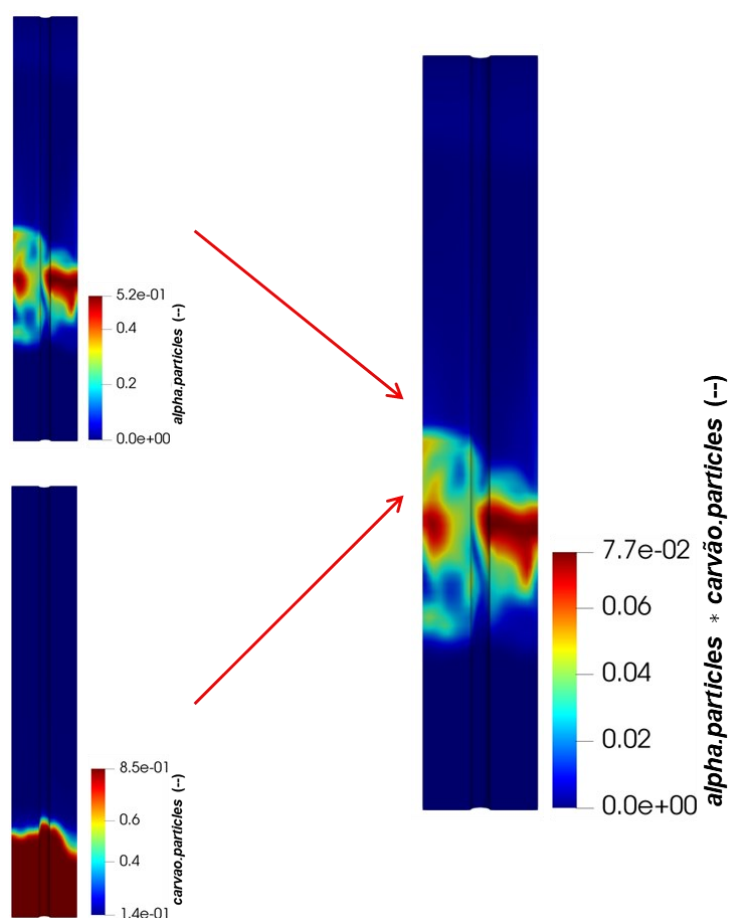


Figura 4.51 – Operação sobre os campos de fração mássica da espécie química carvão (*carvão.particles*) e de fração mássica da fase biomassa (*alpha.particles*) para identificação da zona do reagente (carvão) da reação química de Boudouard

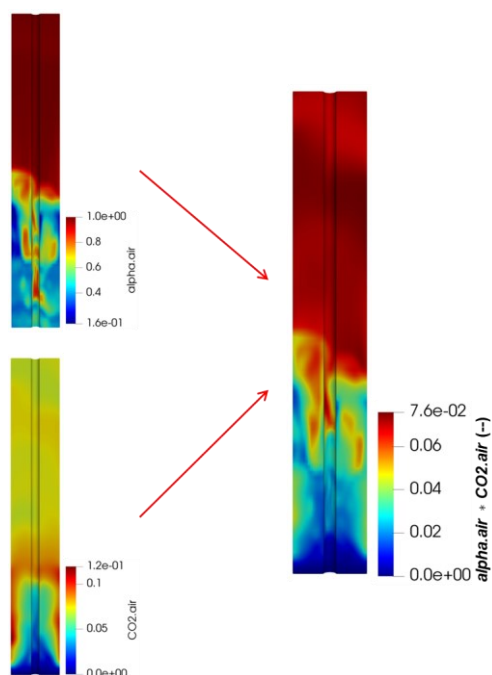


Figura 4.52 – Operação sobre os campos de fração mássica da espécie química CO_2 (CO2.air) e de fração mássica da fase gás ($\alpha\text{.air}$) para identificação da zona do reagente (CO_2) da reação química de Boudouard

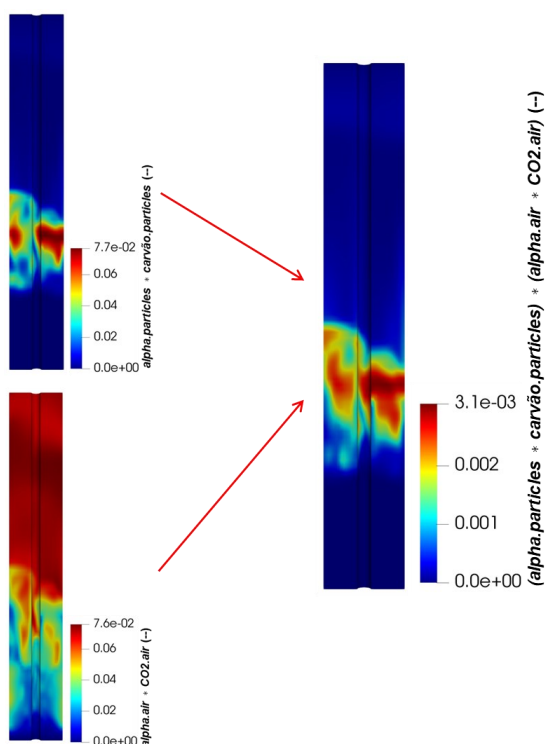


Figura 4.53 – Operação sobre os campos de fração mássica das espécies química carvão e CO_2 multiplicadas pela fração mássica de sua fase para identificação da zona dos reagentes da reação química de Boudouard, conforme a Eq. (4.14)

Desse modo, foram determinadas as zonas de reação de cada uma das reações químicas presentes. As Fig. 4.54 a 4.57 demonstram o aspecto visual desse procedimento para as reações de *Boudouard*, *Methanation*, *Devolatilização* e *Reforming of Char*, respectivamente.

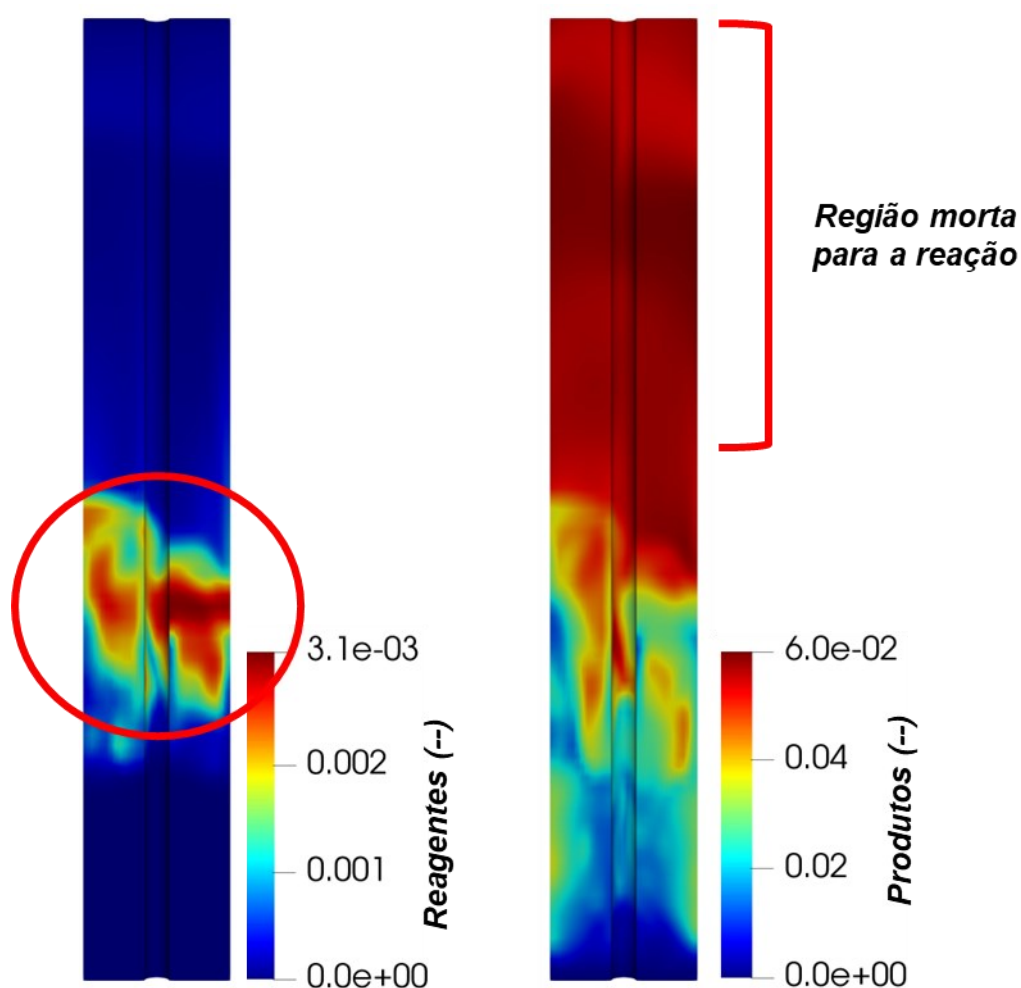


Figura 4.54 – Representação gráfica do cálculo da fração mássica de reagentes e produtos da reação *Boudouard* e indicação da zona de reação (circunferência) e zona não reativa (morta) dessa reação devido à ausência de todos reagentes dela na *freeboard*

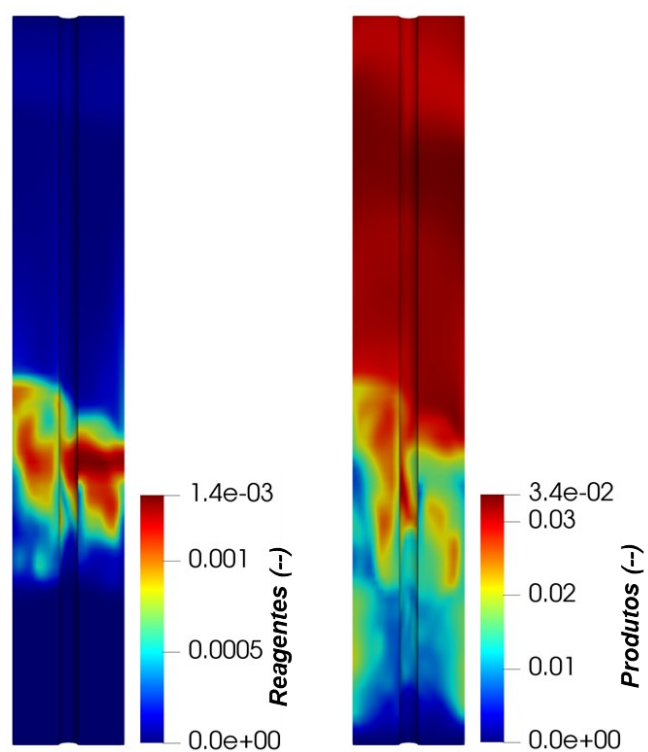


Figura 4.55 – Representação gráfica do cálculo da fração mássica de reagentes e produtos da reação *Methanation*

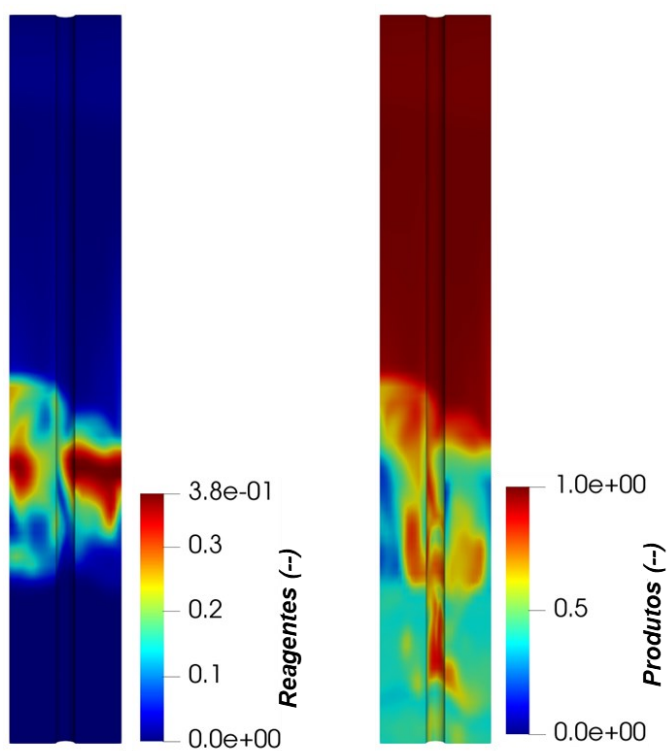


Figura 4.56 – Representação do cálculo da fração mássica de reagentes e produtos da reação de Devolatilização

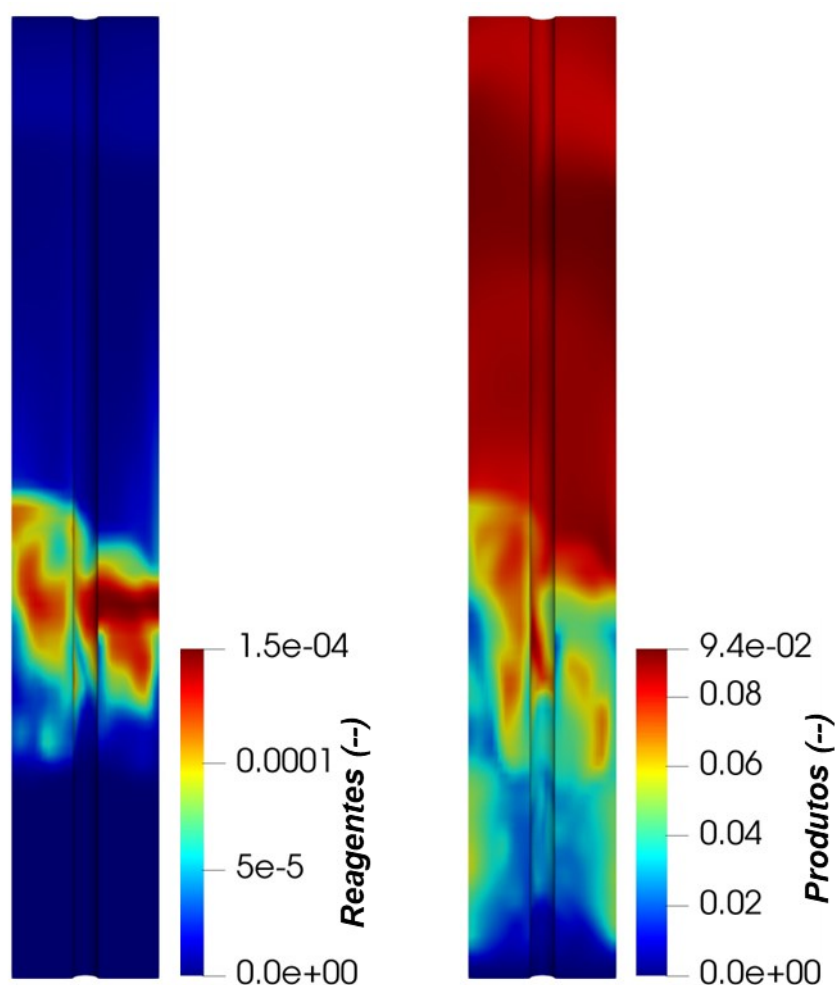


Figura 4.57 – Representação gráfica do cálculo da fração mássica de reagentes e produtos da reação *Reforming of Char*

As reações heterogêneas das Fig. 4.54 a 4.57 demonstradas, por envolverem a espécie sólida de carvão (*carvão.particles*) ou biomassa (*bio.particles*), no caso da Devolatilização, tem zona preferencial somente onde houver essa espécie no leito fluidizado, em que a *freeboard* do reator não determina progresso na formação uma vez que não há os reagentes necessários para essa reação, se tratando de uma zona morta. Nesse sentido, caso o intuito seja formação dos produtos de alguma dessas reações, o aumento da altura do reator (*freeboard*) não promoverá aumento na concentração dessas espécies produto da reação. Por outro lado, as reações heterogêneas e a devolatilização térmica podem ser favorecidas aumentando-se a altura do leito fluidizado e/ou fazendo a injeção de biomassa no ponto mais baixo possível do reator. Outras alterações de projeto não testadas no presente trabalho como a utilização de areia com densidade mais próxima da densidade da biomassa amenizando a flutuação da biomassa sobre a areia (mais densa) também pode contribuir no tempo de

contato com o leito fluidizado. Dessa forma, promover-se-ia maior interação com o leito, de alta capacidade térmica, e maior degradação térmica dos componentes.

As Fig. 4.58 a 4.60 demonstram as zonas do escoamento onde os reagentes e produtos das reações homogêneas consideradas no modelo são predominantes. Ao contrário das reações heterogêneas, percebe-se que as reações envolvendo apenas espécies gasosas ocorrem preferencialmente na *freeboard* do reator (Fig. 4.58). Nesse sentido, as alterações de projeto, como aumento da altura total do reator, visando maior produção das espécies produtos dessas reações podem ser vantajosas na otimização do equipamento.

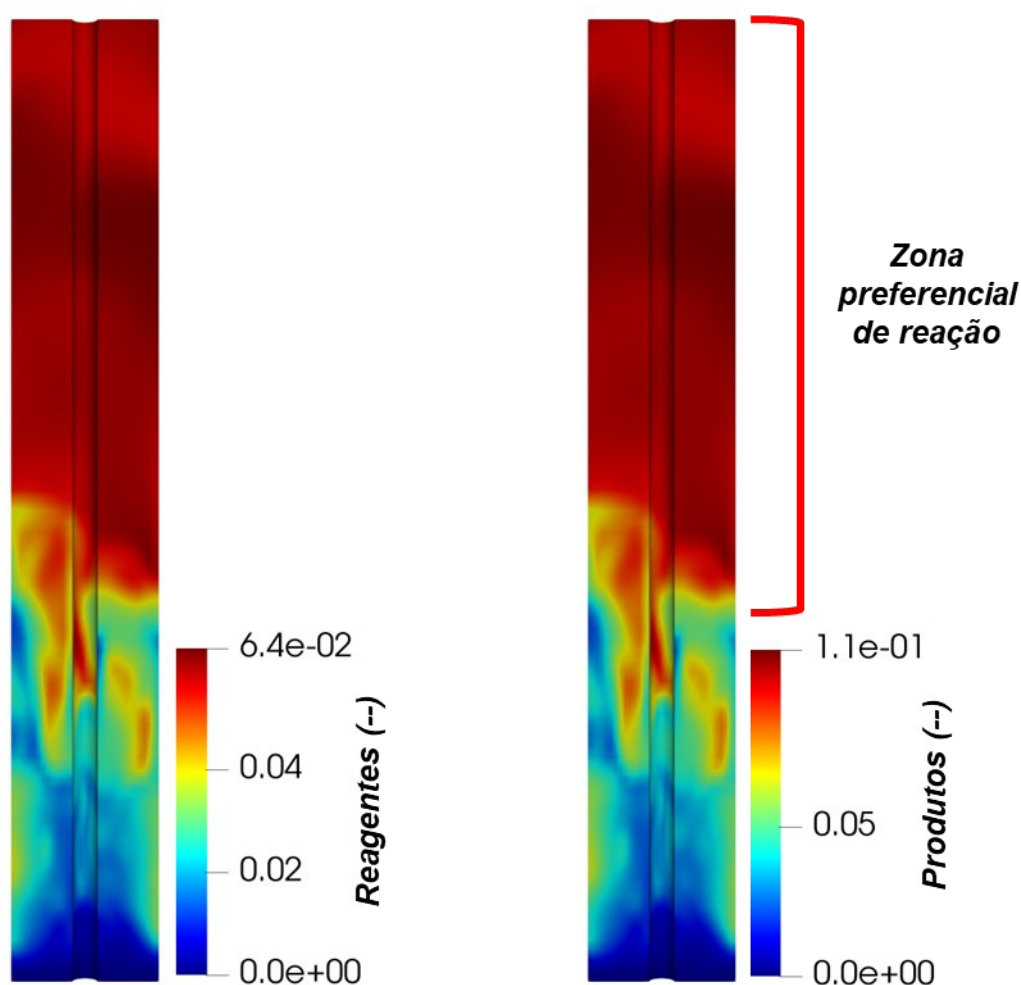


Figura 4.58 – Representação gráfica do cálculo da fração mássica de reagentes e produtos da reação *Water-Gas Shift* e indicação da zona preferencial das reações homogêneas (*freeboard* do reator)

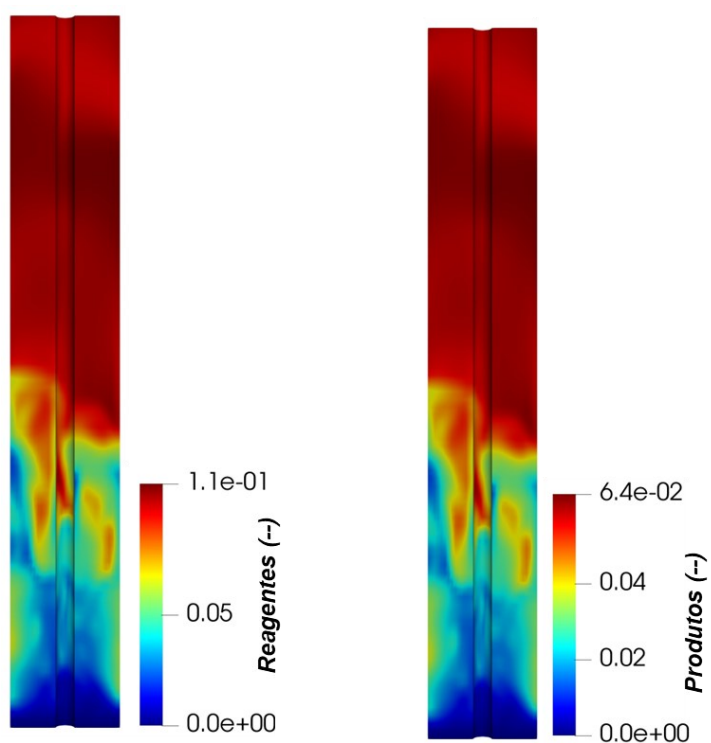


Figura 4.59 – Representação gráfica do cálculo da fração mássica de reagentes e produtos da reação *Reverse Water-Gas Shift*

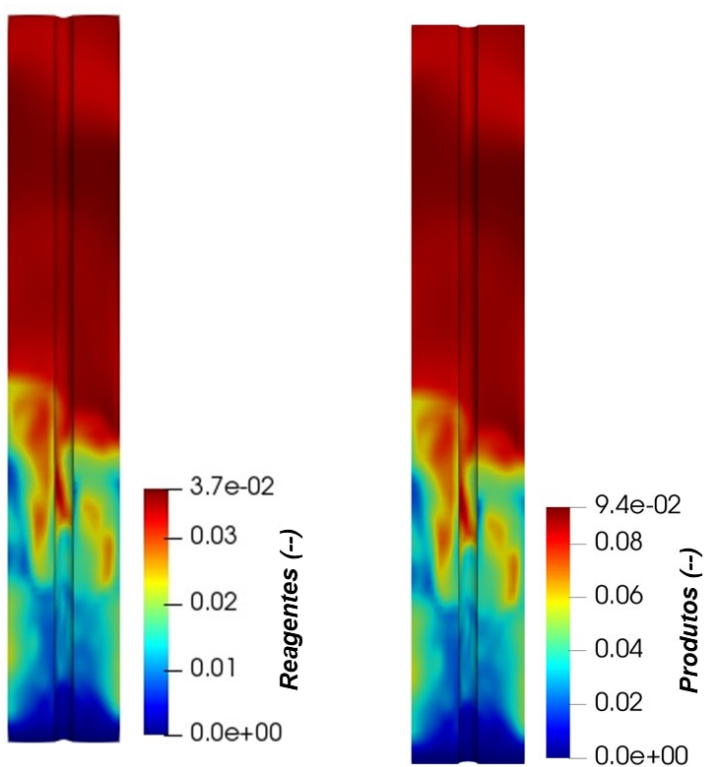


Figura 4.60 – Representação gráfica do cálculo da fração mássica de reagentes e produtos da reação *Methane-Steam Reforming*

Apesar da zona preferencial das reações homogêneas ser a *freeboard* do reator, por meio da Fig. 4.61, observa-se que no leito fluidizado também há formação das espécies produtos de reações homogêneas, evidenciada pela diminuição (consumo) da espécie reativa de oxigênio (O_2) ao longo do escoamento ascendente pelo leito fluidizado sólido. Essa é caracterizada pela zona preferencial de reações oxidativas, incluindo a degradação térmica presente da Devolatilização da biomassa. O significado maior da denominação Devolatilização, i.e., liberação de voláteis presentes na biomassa é evidenciado nessa região. Outra constatação relevante é a escassez de oxigênio ao longo da *freeboard* do reator, alcançando fração mássica de aproximadamente 1,8% ao longo de toda sua extensão, o que indica a não ocorrência de reações homogêneas oxidativas (incluindo combustão). Portanto, diferentemente de um incinerador, o reator de gaseificação tem como prioridade as reações de redução ao longo da *freeboard* do reator – evidenciado nos resultados do presente trabalho – de modo a garantir que a energia recuperada da biomassa seja contida no gás de síntese produzido e não queimada para a produção de calor internamente no reator.

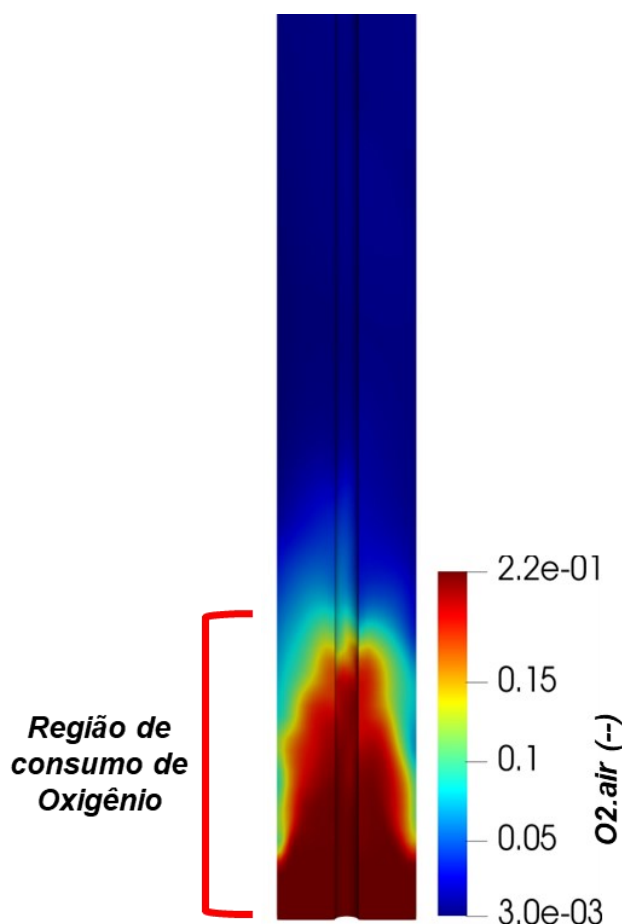


Figura 4.61 – Representação da fração mássica de oxigênio (O_2) injetado pela superfície de controle *inlet*

De forma correspondente à termoquímica, a energia térmica do escoamento no reator é representada na Fig. 4.62. Observa-se o aquecimento eficiente do ar insuflado, à 673 K (400 °C), durante a rápida passagem pelo leito fluidizado, atingindo temperaturas próximas de 1123 K (850 °C) na superfície de saída *outlet*. No estágio da Fig. 4.62, em que o sistema se encontra em regime contínuo (em $t = 20\text{ s}$), a temperatura de grande parte da biomassa, inserida no reator à 303 K (30 °C), corresponde à aproximadamente 1000 K. Para fins de quantificação, a temperatura média geral das partículas de biomassa de todos volumes finitos do reator Fig. 4.63 determinam fortemente as taxas das reações heterogêneas envolvidas (Fig. 4.64). O leito fluidizado cumpre a função de inércia térmica, contendo a energia térmica no meio poroso necessário para a transferência térmica às outras fases reagentes. Esses atributos do reator da Planta Piloto de Mauá-SP permite que a energia térmica seja propriamente destinada à degradação térmica da biomassa a fim de liberar as espécies gasosas de interesse à recuperação energética e produção do gás de síntese.

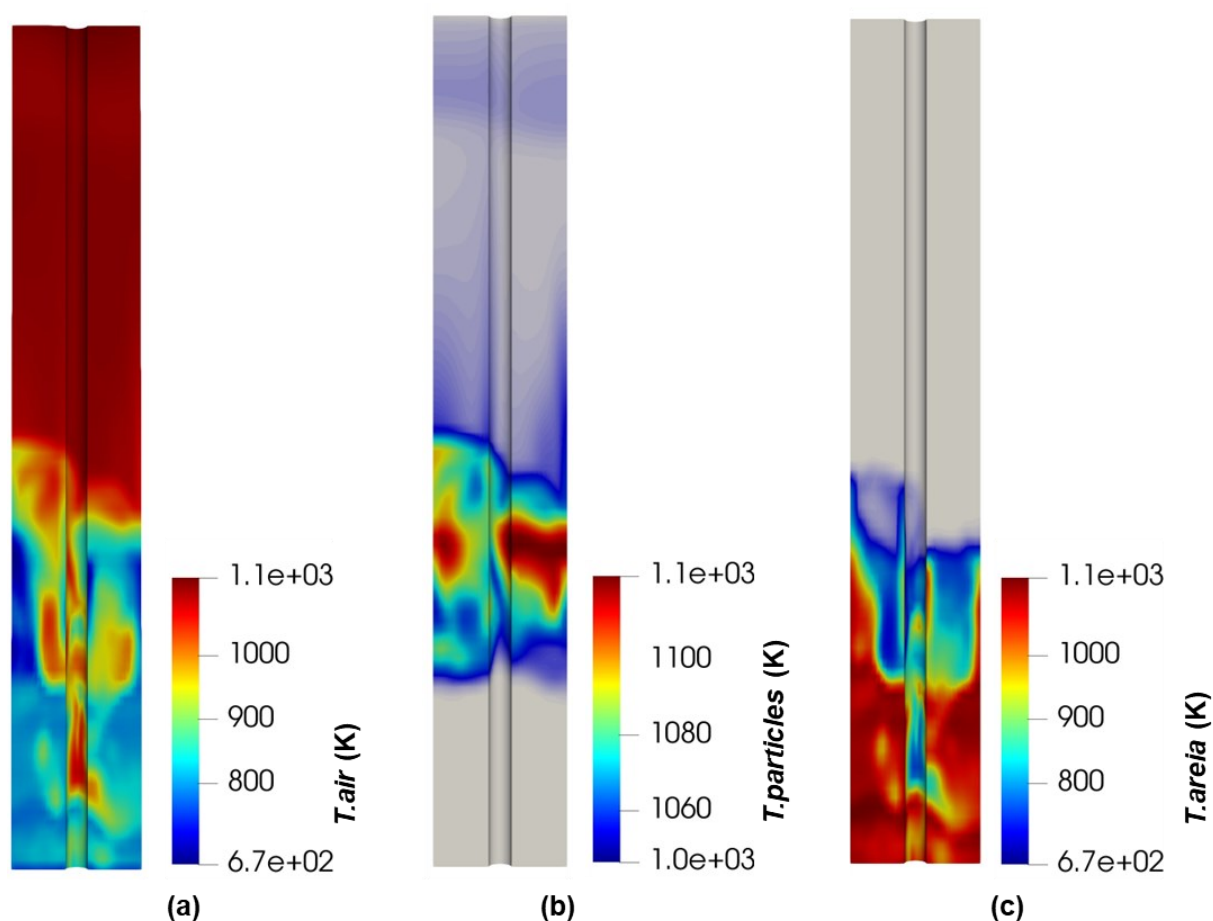


Figura 4.62 – Temperatura das fases (a) gás, (b) biomassa e (c) areia em $t = 20\text{ s}$ de simulação. Obs.: A cor cinza foi utilizada onde não há presença da fase

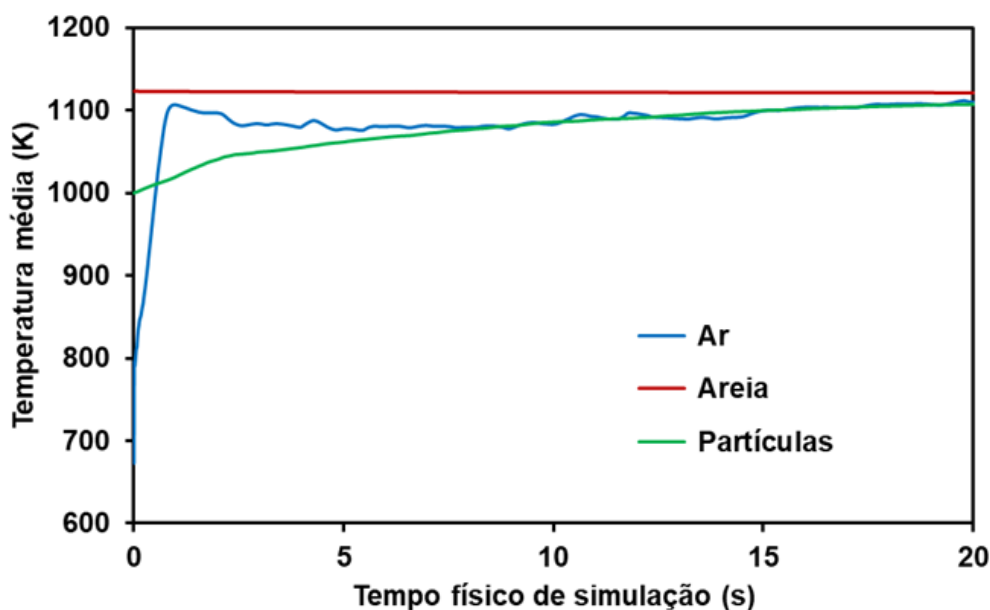


Figura 4.63 – Temperatura média geral do sistema para cada fase do modelo ao longo do tempo físico de simulação

As simulações em regime estabilizado com a devida definição das taxas das reações envolvidas (Fig. 4.64), principalmente reações heterogêneas, indicam a intensidade e a relevância dessas reações em temperaturas próximas da temperatura configurada de operação do reator (1123 K ou 850 °C). Observa-se que a reação *Reforming of Char* possui taxa de reação significativamente menor que as demais, consecutivamente, interferindo nos produtos H_2 e CO presentes no syngas.

Outra constatação é a forte dependência das reações de *Boudouard* e *Methanation* com variáveis oscilatórias, sejam devido às taxas de difusão (R_{diff}) e cinética (R_{kin}), pressão local (P_i) ou fração mássica dos gases envolvidos (n_i), causando efeito oscilatório na taxa de reação, conforme a Fig. 4.64. Com relação à Devolatilização, sua evolução é mais constante, acompanhando a evolução da temperatura das partículas de biomassa. Portanto, a operação do Reator da Planta Piloto de Mauá-SP pode considerar a promoção da devolatilização em função da temperatura, enquanto as demais reações heterogêneas são significativamente influenciadas pela quantidade de movimento e turbulência no leito.

De fato, conforme demonstrado na Seção 3.8, as equações (3.46) e (3.50) indicam a dependência proporcional da taxa de reação com a temperatura (T). Logo, o fator não considerado no presente modelo referente à distribuição de temperatura em cada partícula pode ser fator relevante nas análises termoquímicas que necessitaria melhor investigação. Contudo, há que se considerar também que a energia térmica transferida da superfície ao interior da partícula de biomassa não é um fenômeno instantâneo ferindo a hipótese

considerada no presente modelo de temperatura constante em toda a partícula. Por outro lado, as taxas de reação consideram diâmetro constante (superfície reativa constante), não importando a temperatura de seu interior. Esse efeito é compensado pela rarefação da biomassa, i.e., diminuição gradativa da fração mássica, representando seu consumo. Logo, o presente modelo faz certa compensação de algumas hipóteses simplificadoras adotadas na Seção 3.4, adaptando seu desenvolvimento para o compromisso **custo computacional** × **cumplicidade de detalhes CFD**.

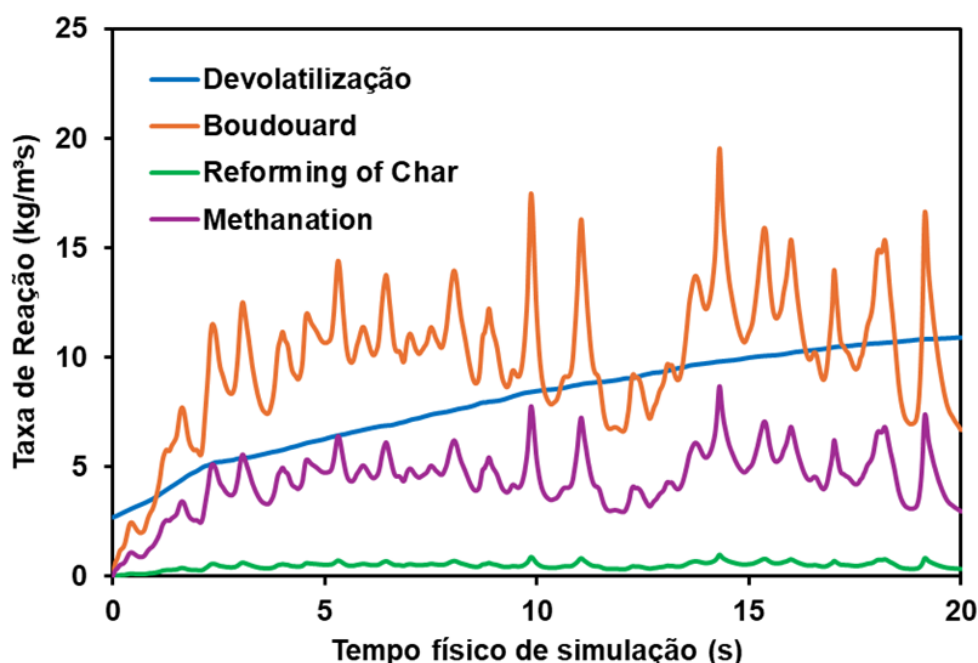


Figura 4.64 – Progressão da taxa das reações químicas de Devolatilização, *Boudouard*, *Reforming of Char* e *Methanation* ao longo do tempo físico de simulação

Nessa etapa do desenvolvimento do modelo, também foi possível determinar os **tempos de estabilização** referentes aos fenômenos da fluidodinâmica e da termoquímica envolvida no processo. Por meio da Fig. 4.65, partes (a) e (b), verifica-se que o tempo de estabilização fluidodinâmica do reator em condições de operação contínua (a partir de um caso já parcialmente estabilizado) é de aproximadamente 5 s, i.e., o tempo físico de simulação mínimo necessário para que o reator atinja condições em que sua fluidodinâmica (incluindo a pressão de insuflamento) não apresentará grandes variações a partir desse intervalo. Nesse sentido, a pressão de insuflamento oscilará com amplitude aproximadamente constante, devido ao regime de fluidização borbulhante, dentro ainda de um intervalo fixo, de forma semelhante ao demarcado em vermelho nas Fig. 4.5 e 4.6.

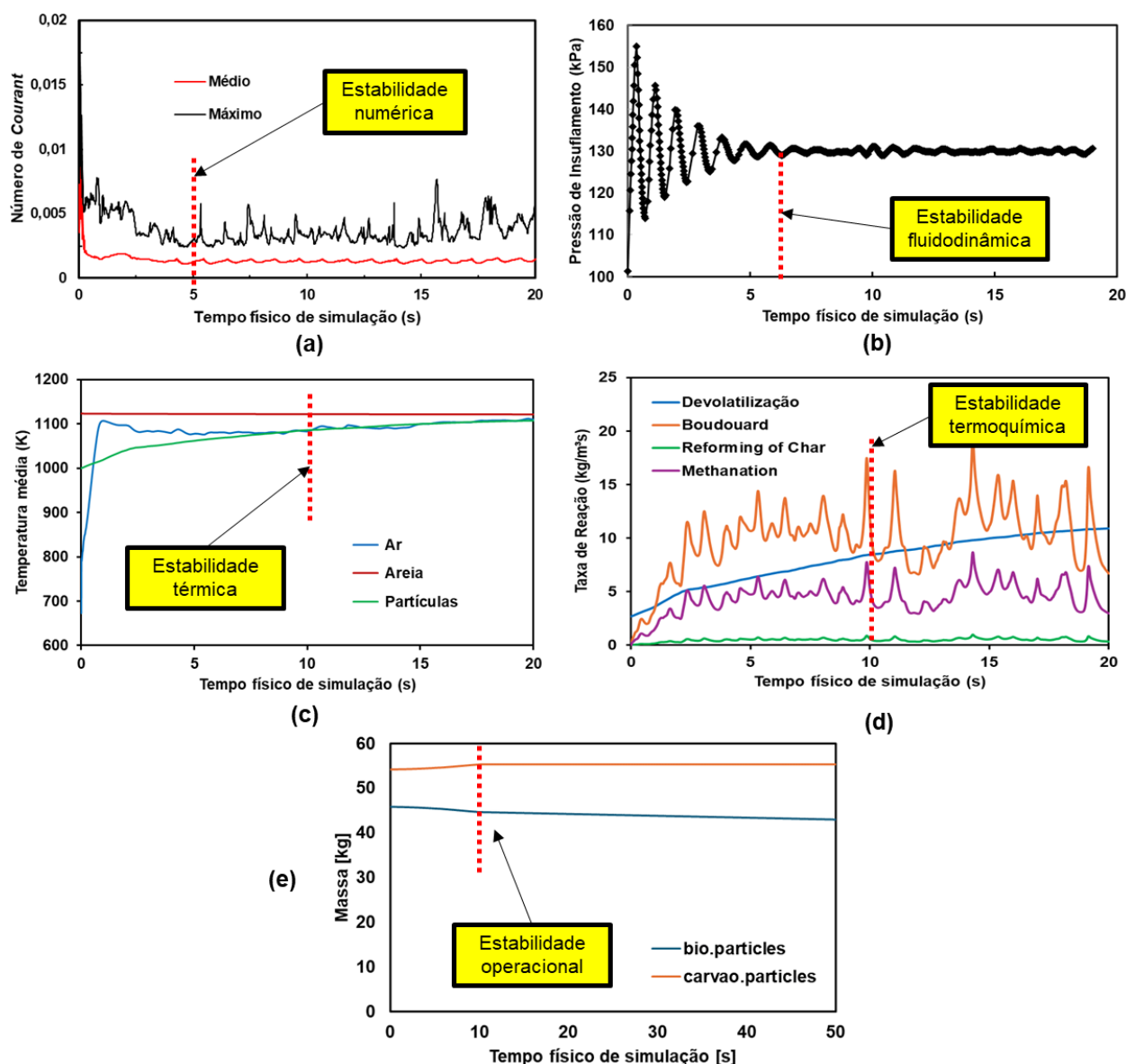


Figura 4.65 – Estabilidade do modelo em termos (a) numérico-computacional, (b) estabilidade fluidodinâmica, (c) estabilidade térmica, (d) estabilidade termoquímica e (e) estabilidade operacional do reator ao longo do tempo físico de simulação

A mesma condição deve ocorrer para os parâmetros termoquímicos do processo (Fig. 4.65c): ao se atingir a estabilidade da temperatura das fases, principalmente gás e biomassa, as taxas das reações envolvidas atingem equilíbrio (Fig. 4.65d). Nesse sentido, a competitividade de reações também tende a se estabilizar e, por fim, a composição do gás liberado pela superfície de controle *outlet* não apresenta variações significativas. Por meio da Fig. 4.65c é possível inferir que o tempo físico de simulação necessário para estabilização da temperatura das fases envolvidas é de 10 s. Enquanto o tempo para atingir a estabilidade de composição química do syngas (Fig. 4.65d) é também de 10 s.

Em se tratando da aplicação prática desses tempos, eles são bastantes úteis para a coleta adequada de dados via simulações, o que pode ser bastante diferente na realidade do experimento físico na planta piloto, uma vez que se trata de um sistema que depende de outras variáveis a serem controladas (ex.: temperatura de insuflamento de ar, qualidade do isolamento térmico do reator etc.). Assim, a operação do mesmo deve se atentar, por exemplo, ao fato de como são medidas as temperaturas internas do reator a fim de se atingir a estabilização de temperatura geral interna das fases, amplitude de oscilação da pressão de insuflamento e obtenção do valor médio desse parâmetro. Essas nuances podem implicar em maiores tempos necessários para estabilização do sistema.

4.4. Performance de Gaseificação

Todos os parâmetros apresentados na presente sessão são importantes para a avaliação geral da tecnologia de gaseificação apresentada, cada um com seu enfoque, e são amplamente utilizados na literatura para análise desses equipamentos. Por exemplo, o poder calorífico inferior do gás de síntese (PCI_{syngas}) é um dos principais parâmetros obtidos pela gaseificação, uma vez que representa a energia total recuperada da biomassa de CDRSU. O seu valor foi calculado pela metodologia apresentada no trabalho de dissertação do presente autor (MONTEIRO, 2019) resultando no seguinte valor:

$$PCI_{syngas} = LHV_{syngas} = 4.900 \text{ kJ/kg} \quad (4.14)$$

A relação desse valor com o poder calorífico inferior da biomassa de CDRSU ($PCI_{CDRSU} = LHV_{CDRSU}$) reflete a razão de recuperação de energia com relação a uma possível queima direta da biomassa em um incinerador, por exemplo. Ou seja, representa o percentual de energia recuperada da biomassa; consistindo, portanto, no mais relevante indicador de desempenho de muitos processos termoquímicos como o da gaseificação. Essa relação (R_{LHV}) é calculada pela equação seguinte:

$$\eta_{gaseificação} = R_{LHV} = \frac{LHV_{syngas}}{LHV_{CDRSU}} \times 100 = \frac{4.900}{14.600 \text{ (kJ/kg)}} \times 100 = 33,6\% \quad (4.15)$$

Trata-se de um parâmetro similar ao CGE , porém, de forma simplificada a fim de representar a relação entre PCI do produto com relação à matéria-prima (biomassa). Portanto, um parâmetro também de avaliação subjetiva quanto à sustentabilidade, permitindo a inferência sobre a conversão de energia útil de uma biomassa sólida e de grande ocupação

volumétrica para um combustível gasoso, compressível, de fácil transporte e utilização versátil em diferentes ciclos de potência. O valor encontrado na Eq. (4.15) diz respeito à porcentagem da energia disponível por kg de syngas em relação à energia disponível por kg de CDRSU.

Demais parâmetros também são propostos por diversos autores a fim de caracterizar o processo termoquímico utilizado, em que se inserem a Eficiência de Conversão de Carbono (*CCE*) e a Eficiência de Gaseificação (*CGE*), calculados conforme as seguintes equações:

$$CCE(\%) = \frac{\dot{m}_{syngas} \times Y_{syngas} \times (\alpha_{CH_4} + \alpha_{CO} + \alpha_{CO_2} + \alpha_{C_2H_4} + \alpha_{C_2H_6} + \alpha_{C_3H_8}) \times \frac{12}{22,4}}{\dot{m}_{biomassa} \times \%C_{biomassa}} \quad (4.16)$$

$$CCE(\%) = \frac{704,3 \left(\frac{kg}{h}\right) \times 1,00 \times (5,1 + 9,9 + 12,8 + 2,3 + 0,2 + 0,8) \times \frac{12}{22,4}}{296 \left(\frac{kg}{h}\right) \times 54\%}$$

$$CCE(\%) = 73,3\%$$

$$CGE(\%) = \frac{\dot{m}_{syngas} LHV_{syngas}}{\dot{m}_{biomassa} LHV_{biomassa}} \times 100 = \frac{704,3 (kg/h) \cdot 4.900 (kJ/kg)}{296 (kg/h) \cdot 14.600 (kJ/kg)} = 79,8\% \quad (4.17)$$

Tabela 4.6 – Parâmetros de performance típicos encontrados na literatura (THOMSON et al., 2020)

Tipo de Gaseificador	LHV (MJ/m ³)	CCE (%)	CGE (%)
Leito Fixo (<i>Downdraft</i>)	4-6	< 85	65-90
Leito Fixo (<i>Updraft</i>)	5-6	40-85	20-60
Leito Fluidizado Borbulhante	4-7	70-90	70-90
Leito Fluidizado Circulante	4-6	80-90	50-70
Escoamento Injetado (<i>Entrained</i>)	10-12	84-94	65-80
Leito Fluidizado Dual	13-20	95	80
Plasma	10-25	> 95	NI

A Razão Ar Combustível (*RAC*), geralmente utilizada na avaliação de processos exclusivamente de combustão, compõe o cálculo da Razão de Equivalência (*ER*), que é amplamente utilizada para comparação entre processos termoquímicos de gaseificação. Uma vez que a gaseificação ocorre em desprovisionamento de oxigênio, impossibilitando a exclusividade de processos oxidativos no reator, a razão *ER* tem grande importância na caracterização daquele processo. O controle das reações de redução é baseado na manutenção da alta temperatura em escassez de oxigênio, o que prioriza a degradação térmica dos componentes e sua quebra pela injeção de energia térmica. Essa característica evidencia o comportamento endotérmico do processo. Nesse sentido, a energia liberada pelas reações exotérmicas do

processo é recuperada na composição química dos produtos formados resultante no gás de síntese liberado pelo reator.

A vazão de ar em razão estequiométrica para a situação ideal de combustão completa do CDRSU foi definida considerando-se ainda a massa de oxigênio contida originalmente nos componentes dessa biomassa, balanço estequiométrico das reações de combustão envolvidas e composição do ar atmosférico em termos de fluxo no balanço de combustão (INFIESTA; INFIESTA JR., 2016). Desse modo, os valores obtidos foram:

$$RAC_{estequiométrica} = \frac{\dot{m}_{ar_{esteq.}}}{\dot{m}_{CDRSU}} = \frac{2252,27 \text{ (kg/h)}}{296 \text{ (kg/h)}} = 7,61 \quad (4.18)$$

$$RAC_{real} = \frac{\dot{m}_{ar_{real}}}{\dot{m}_{CDRSU}} = \frac{488,54 \text{ (kg/h)}}{296 \text{ (kg/h)}} = 1,65 \quad (4.19)$$

$$ER = \frac{RAC_{real}}{RAC_{estequiométrica}} = \frac{\dot{m}_{ar_{real}}}{\dot{m}_{ar_{esteq.}}} = \frac{1,65}{7,61} = 0,217 = 21,7\% \quad (4.20)$$

Os autores (HWANG et al., 2021) realizaram trabalhos envolvendo a gaseificação em leito fluidizado borbulhante, apresentando a seguinte análise paramétrica da Fig. 4.66. Observa-se que o valor de $ER = 0,21$ refletem o maior valor de PCI do syngas e um bom valor de CGE referente à eficiência de seu processo de gaseificação. O valor de $ER = 0,217$ obtido no presente trabalho corrobora com os estudos daqueles autores, uma vez que o objetivo maior é produzir um gás de síntese capaz de ser utilizado para a geração de energia térmica e/ou motora em ciclos de potência. Quanto maior é a relação ER utilizada no processo de gaseificação, menor será a CCE , referente à conversão do carbono em espécies gasosas, devido à maior taxa de reação das reações oxidativas. Nesse caso, pode haver a desvantagem de se liberar a energia térmica oriunda das reações exotérmicas (de combustão) no reator de gaseificação, onde o objetivo maior é direcionar essa energia química para o syngas sem sua liberação espontânea no gaseificador.

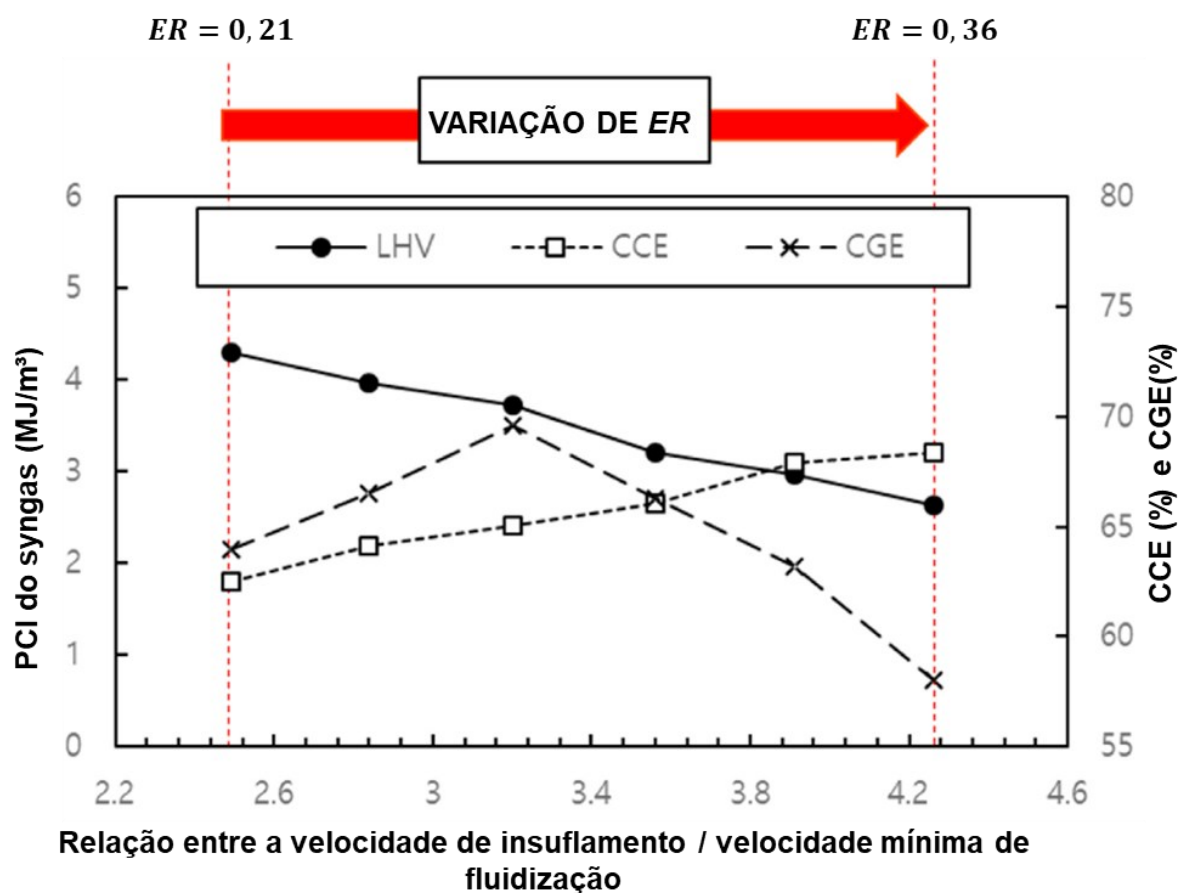


Figura 4.66 - Efeito da combinação de parâmetros sobre os parâmetros de performance. Adaptado de Hwang et al. (2021)

4.5. Análise Paramétrica

Nesta seção, foram testadas condições similares variando-se parâmetros do próprio modelo implementado, além da avaliação dos resultados obtidos com implementações adicionais de atributos, como inserção de reações químicas e alterações da composição da biomassa utilizada.

4.5.1. Inclusão de outras reações químicas

As reações **Dry-CO₂ reforming** e **Redução** (Tab. 3.4), respectivamente indicadas por:



foram adicionadas a modelagem de reações homogêneas (gás-gás) a fim de se avaliar a composição do syngas obtido. Tal implementação foi importante para investigar o efeito da inclusão de novas reações na composição do gás de síntese.

Os resultados das simulações com a inclusão dessas 02 (duas) novas reações homogêneas ao modelo CFD, exibido na Fig. 4.67, permitiram concluir que há variação significativa na composição final do syngas produzido.

Contudo, tais resultados afastaram-se da composição do syngas obtida na Planta Piloto de Mauá-SP e o custo computacional também foi mais demandante. Por essas razões, optou-se por manter o modelo computacional apenas com as 04 (quatro) reações químicas homogêneas originalmente definidas na Seção 3.4.7.

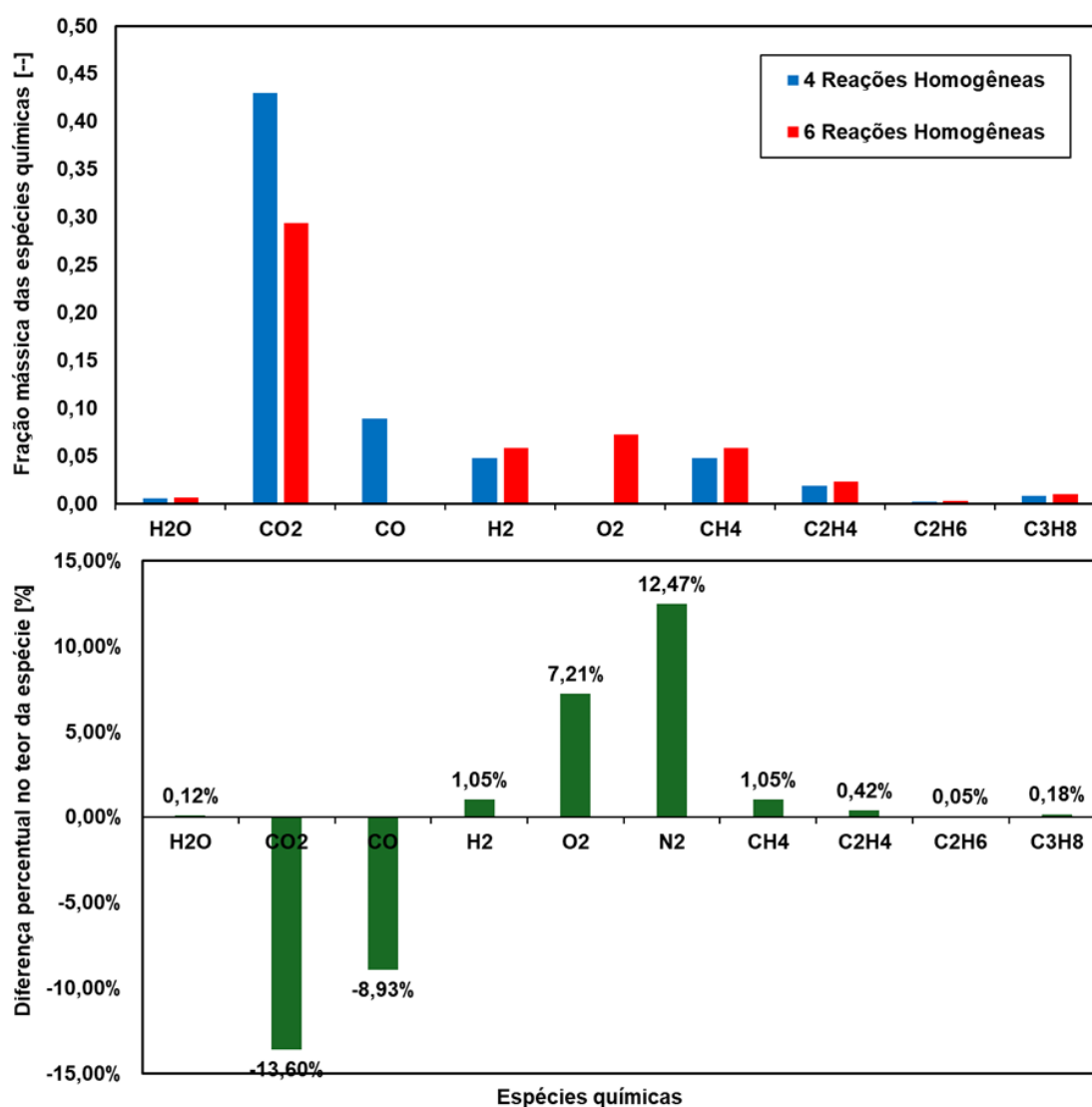


Figura 4.67 – Composição do syngas produzido ao se utilizar mais reações químicas ao modelo e variação percentual no teor de cada espécie química

4.5.2. Tamanho médio de partículas de CDRSU

A implementação de diferentes tamanhos (“diâmetro”) do CDRSU foi pensada a fim de se avaliar a necessidade do processo de trituração do CDRSU durante seu processo produtivo, detalhadamente descrito por Infiesta et al. (2019a). O intuito foi de observar a diferença de composição do syngas produzido aumentando-se o diâmetro, i.e., dispensando a necessidade dos estágios finais de trituração. As principais alterações causadas, discernidas pela teoria implementada no modelo computacional, são de cunho termoquímico e fluidodinâmico, afetando diretamente as taxas de reações e as forças envolvidas, como arrasto e empuxo.

Entretanto, com relação à composição do syngas obtida, demonstrada na Fig. 4.68, não houve alteração química significativa com relação ao diâmetro original do CDRSU, de 20 mm. Os diâmetros de 50 mm e 100 mm foram testados sem variação significativa na produção das espécies de maior interesse ao PCI do gás de síntese. Ademais, não foi observado reação química favorecida com as mudanças implementadas nas simulações.

Os resultados indicam que um menor grau de trituração realizado sobre o CDRSU não implica grandes alterações em termos da termoquímica do reator. Cabendo, portanto, melhores avaliações e testes utilizando outros tamanhos de partículas de biomassa visando a otimização da operação da planta e da composição final do gás.

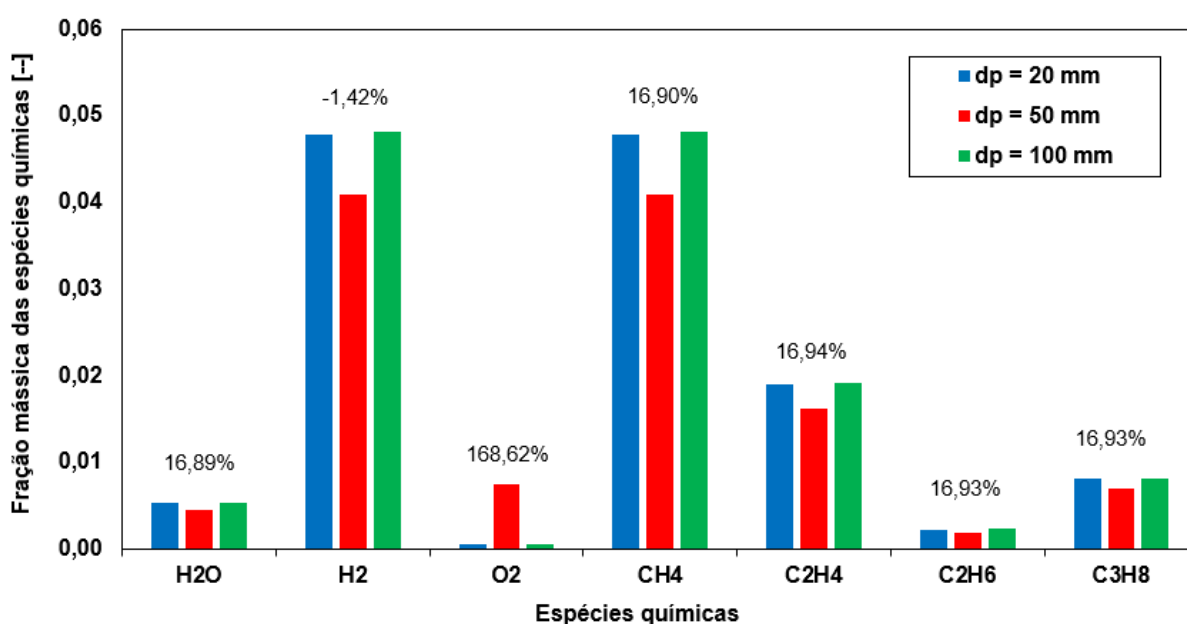


Figura 4.68 – Fração mássica das espécies químicas presentes no syngas em função da variação do diâmetro do CDRSU no leito e demonstração do percentual de variação máxima. Informações em condições estabilizadas

4.5.3. Alteração na temperatura do CDRSU no reator

A análise do parâmetro de temperatura do CDRSU foi uma análise peculiar conduzida aproveitando-se da possibilidade (exclusivamente) do software de se configurar a temperatura de determinado campo por meio de funções do OpenFoam (*setFields*). Com essa ferramenta, foi possível configurar apenas a temperatura do campo de *particles* (representativa do CDRSU) para os valores de 800 K, 1000 K e 1200 K.

O objetivo foi o de analisar a composição do syngas produzido na saída do reator em operação estabilizada. O resultado, demonstrado na Fig. 4.69, permitiu observar que as taxas de reações e formação dos principais gases de interesse, como H_2 e CH_4 , são aumentados; reduzindo-se ainda o teor resultante do gás CO_2 , que não contribui no PCI do gás de síntese. Evidentemente, que esse tipo de alteração não é possível em termos práticos da operação de um reator real. Contudo, infere-se a temperatura operativa especificamente da biomassa CDRSU impacta significativamente na formação das espécies químicas de interesse no gás produzido, aumentando-se o PCI final desse produto.

Nesse sentido, uma avaliação que pode trazer resultados positivos é a possibilidade de se trabalhar com CDRSU pré-aquecido para injeção no sistema. Promovendo-se, assim, maior formação das espécies de interesse no gás de síntese e, consequentemente, aumentando-se a eficiência do processo.

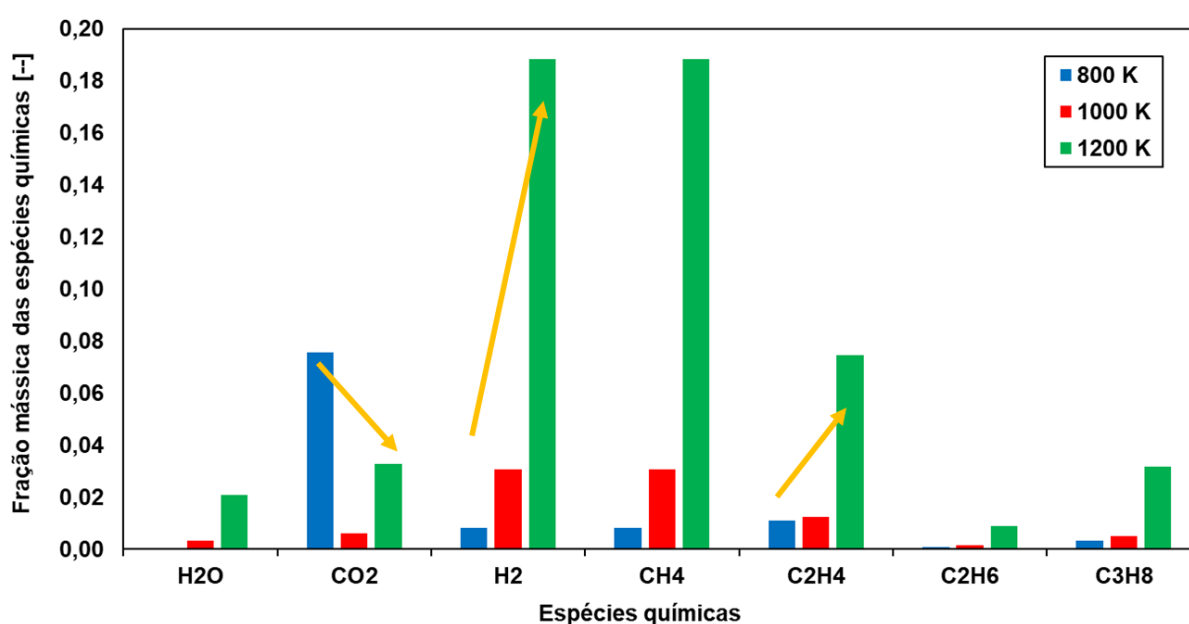


Figura 4.69 – Fração mássica das espécies químicas presentes no syngas em função da variação da temperatura média do CDRSU no leito. Informações em condições estabilizadas

4.5.4. Variação na quantidade de areia no leito

Considerando que a quantidade de material de leito afeta diretamente a pressão de insuflamento do ar e, conseqüentemente, a fluidodinâmica do escoamento do reator, a influência na variação na quantidade inicial do componente de areia foi avaliada em termos da composição do syngas obtida em cada caso.

A Fig. 4.70 demonstra os casos testados, com 1250 kg (-50%), 2652 kg (quantidade original) e 3250 kg (+22%), em seu estado inicial e final, pós estabilização da composição do syngas obtida no *outlet*. Avaliando-se as frações mássicas das espécies do gás de síntese (Fig. 4.71), observa-se variações significativas à composição do syngas e, consecutivamente, seu PCI.

Nesse sentido, infere-se mais uma vez que as interações do arrasto de partículas, quantidade de movimento e interações do gás com os materiais sólidos do leito implicam grandes alterações na termoquímica de formação do syngas.

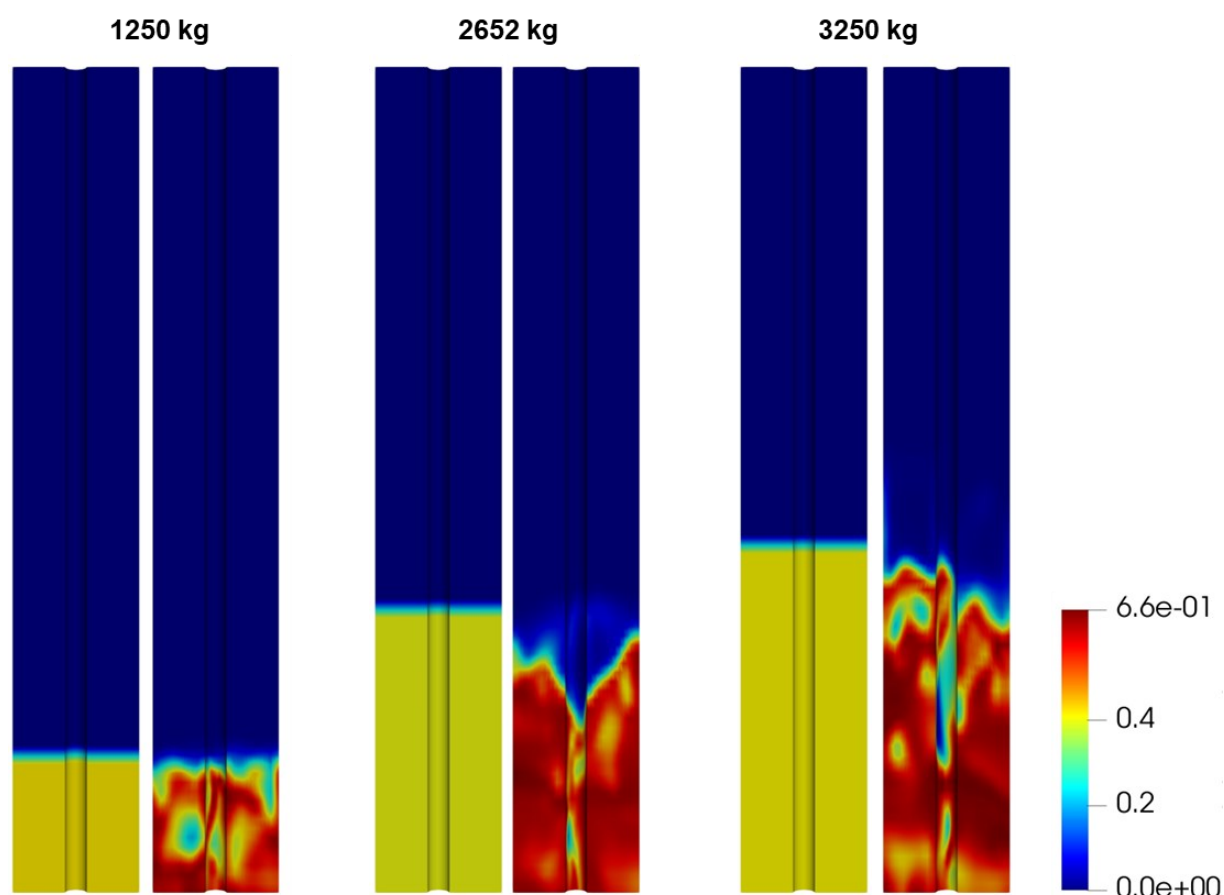


Figura 4.70 – Fração mássica inicial (à esquerda) e final estabilizada (à direita) de areia

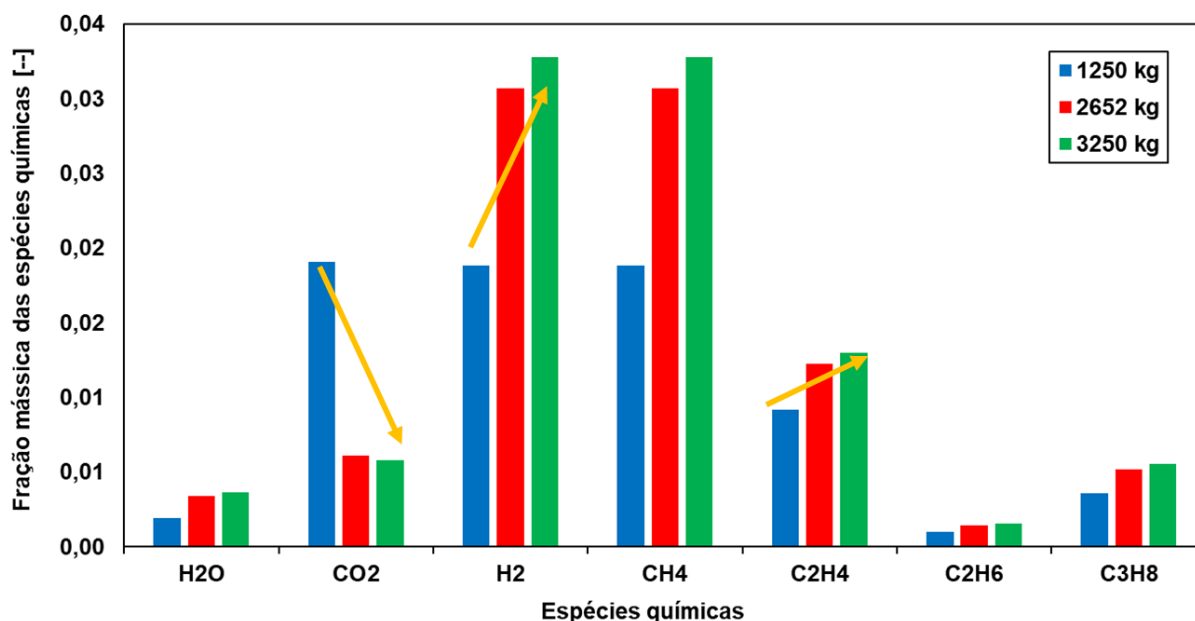


Figura 4.71 – Fração mássica das espécies químicas presentes no syngas em função da variação da quantidade de areia configurada no leito. Informações em condições estabilizadas

4.5.5. Sugestões para avaliação paramétrica

Outras análises poderiam ser conduzidas a fim de se investigar fatores como a alteração do diâmetro de partículas de biomassa e/ou areia às forças de arrasto, a utilização de particulado sólido com polidispersão ou alteração de geometrias do reator, por exemplo:

- aumento da **freeboard** para induzir maior tempo de residência e favorecimento das reações homogêneas;
- alteração da **geometria do insuflamento** a fim de se obter escoamento mais uniforme ou mais turbulento;
- investigação sobre a mudança de **diâmetro do reator** ou
- implementação de geometrias internas de controle, como **aletas** ou **placas defletoras** a fim de se conter interações de sólidos, por exemplo.

CAPÍTULO V

CONCLUSÕES

No presente trabalho objetivou-se desenvolver um modelo CFD capaz de reproduzir experimentos físicos do reator de gaseificação de larga escala da Planta Piloto de Mauá-SP. Com enfoque na simulação de equipamento de escala semi-industrial daquela planta. A modelagem desenvolvida permite a reprodução de resultados experimentais obtidos, além de possibilitar inferir sobre o comportamento do gaseificador de larga escala à custo computacional reduzido.

Ademais, estudou-se o escoamento típico da gaseificação em larga escala em termos de sua fluidodinâmica e termoquímica envolvida. De modo a contribuir para o desenvolvimento e otimização de tecnologias para processamento de resíduos em larga escala. Como resultados práticos do presente trabalho, apresenta-se:

- (i) O mapeamento de cada um dos **Regimes de Fluidização** do reator da Planta Piloto de Mauá-SP e o estudo de seu funcionamento em operação contínua;
- (ii) A determinação do regime de fluidização (**Borbulhante**) do reator experimental apenas com as informações de operação, sem necessidade de experimentos físicos nessa identificação;
- (iii) Os resultados apresentados demonstram corretamente o consumo de biomassa, conforme na Planta Piloto de Mauá-SP, e, concomitantemente, a produção de carvão e das espécies químicas que compõem o gás de síntese;
- (iv) Boa correlação entre a **composição do syngas** obtida por simulações em relação à obtida na planta experimental;
- (v) A avaliação de parâmetros, como a **fração volumétrica média** de partículas em determinadas regiões, possibilitando a intervenção no design de geometrias internas de controle (ex.: placas defletoras) para o processo;
- (vi) O presente modelo pode contribuir na fabricação, instalação e **otimização de novos reatores**, além de colaborar na previsão dos locais de posicionamento da instrumentação para aquisição de dados, monitoramento de reações químicas de interesse, consecutivamente, para controle da composição do gás de síntese a ser produzido.

Considerando-se a teoria da Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) aplicada à gaseificação em larga escala, por meio do presente trabalho, evidencia-se que:

- A **abordagem Euleriana-Euleriana** mostrou-se viável para investigações de fluidização em larga escala, proporcionando boa precisão e uma solução custo computacional reduzido. Nas avaliações do presente trabalho, a abordagem Euleriana possibilitou a obtenção de resultados satisfatórios e consistentes, além da vantagem computacional, que foi essencial para o desenvolvimento do presente trabalho.
- Os métodos numéricos, modelos e submodelos teóricos de escoamento fluidodinâmico e termoquímico tiveram bom desempenho quando da sua aplicação no reator de **escala semi-industrial**, podendo ser aplicados a equipamentos de larga escala, inclusive sem a necessidade de aumento excessivo na quantidade de células da malha utilizada.
- Considerando o perfil linear da queda de pressão ao longo do leito fluidizado, conclui-se que a *freeboard* do reator não implica em queda significativa de pressão. Portanto, neste sistema, não houve problemas relacionados às interações de parede, como aquelas envolvendo a camada turbulenta, ou a necessidade de maior refinamento da malha nas paredes do reator.
- O estudo de **scaling-up** conduzido no presente trabalho consistiu em um recurso de grande importância para as definições das simulações de larga escala, porém, não se trata de uma ferramenta definitiva. Sua grande vantagem é a utilização de experimentos de escala laboratorial para inferências à larga escala.
- Do ponto de vista computacional-fluidodinâmico, os **modelos de arrasto** amplamente utilizados nas simulações sob abordagem euleriana podem ser utilizados em larga escala sem grande comprometimento para escoamentos monodispersos, cabendo avaliação mais aprofundada no caso polidisperso.

Para o reator da planta piloto de gaseificação em escala semi-industrial simulada (Planta Piloto de Mauá-SP), a modelagem resultou nas seguintes inferências:

- Definição das **zonas de reações químicas** e regiões de maior ocorrência das reações químicas envolvidas.
- Por meio da metodologia termoquímica implementada para cálculo das reações químicas, a operação do Reator da Planta Piloto de Mauá-SP pode considerar a

temperatura como parâmetro mais influente na promoção da devolatilização, enquanto as demais reações heterogêneas são mais influenciadas pela quantidade de movimento e turbulência no leito.

- O aumento de **temperatura operativa do CDRSU** impacta significativamente no aumento da formação das espécies químicas de alto poder calorífico no syngas produzido. A avaliação da possibilidade de utilizar-se de pré-aquecimento do CDRSU antes da injeção pode promover maior qualidade do syngas em termos de PCI.
- A **injeção de biomassa** no reator deve, prioritariamente, ser realizada pela parte mais inferior possível do reator, e/ou ser mantida nesta região, a fim de possibilitar maior troca térmica e de favorecer o processo inicial de degradação térmica.
- A variação na **quantidade de areia** do leito altera significativamente a composição do syngas produzido. Infere-se ainda que a mudança de densidade e/ou no diâmetro desse material também tenha efeitos significativos no gás de síntese.
- O método de injeção de ar, utilização de **grelhas e sopradores** é de grande importância, podendo afetar na distribuição de partículas e no escoamento do leito fluidizado do reator, o que afetaria nas reações químicas.

A tecnologia de gaseificação de CDRSU em leito fluidizado avaliada no presente trabalho, apresenta-se como solução viável e sustentável à problemática do lixo urbano, por meio do processamento termoquímico limpo e adequado às normas ambientais do Brasil. Diferentemente de processos nocivos, como a incineração, a técnica de gaseificação utilizada pela empresa desenvolvedora apresenta indicadores de performance consistentes com a literatura acadêmica referente às tecnologias de gaseificação de resíduos.

As simulações do presente trabalho forneceram resultados consistentes com a teoria e outros estudos, e foram capazes de prever as características de fluidização do reator real, com a exigência relativamente baixa de recursos computacionais, o que viabiliza a experimentação virtual conjunta com a experimentação física.

Tais resultados demonstram que a modelagem computacional implementada é capaz de fornecer resultados consistentes a despeito da fluidização e dos subprocessos químicos do reator de gaseificação de escala semi-industrial da Planta Piloto de Mauá-SP.

SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Apresenta-se as seguintes sugestões para melhorias da modelagem e contribuições à Linha de Pesquisa relacionada ao presente trabalho (em ordem de prioridades, segundo o autor):

- Adaptar o modelo para representar o **Reator de Pesquisa Campus Glória** (Uberlândia-MG) que irá compor as instalações recentes da Universidade Federal de Uberlândia.
- Desenvolvimento de modelo CFD utilizando mais de uma abordagem (**Euleriana-Euleriana-Lagrangeana**) para os diferentes meios no mesmo modelo (Fig. 5.1):
 - Fase Euleriana → Gases
 - Fase Euleriana → Areia
 - Fase Lagrangeana → Biomassa

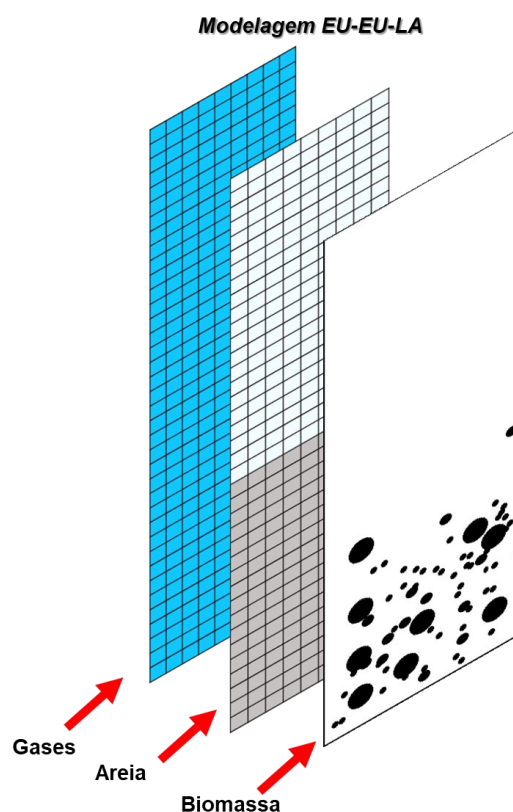


Figura 5.1 – Proposta de modelo híbrido EU-EU-LA

A vantagem de se utilizar esse método (a ser desenvolvido) seria (i) a economia de recurso computacional de se utilizar a abordagem Euleriana para a fase não reativa contendo as numerosas partículas de areia, (ii) as reações químicas são melhores representadas pela

abordagem Lagrangeana cos métodos já previamente implementados nos softwares, inclusive com a (iii) possibilidade de utilizar-se daqueles envolvendo modelagem por agrupamento/pacotes de partículas (método *multiphase particle-in-cell* – *MP-PIC*, (DYMALA; WYTRWAT; HEINRICH, 2021)).

- Implementação de reações químicas auxiliares envolvendo o **Nitrogênio**, **Enxofre**, **Calcário** e/ou **outros hidrocarbonetos** de cadeia carbônica mais complexas. Com tais implementações, o modelo seria capaz de representar a total composição do gás produzido no reator, para fins de verificação e controle de poluentes eventualmente produzidos (dioxinas & furanos, NO_x, alcatrão, etc.).
- Acoplar resultados de simulações da geometria interna do Separador de Partículas (**ciclone**), de modo a incluir a termoquímica do processo para o desenvolvimento de um modelo mais completo.
- Avaliar de forma aprofundada a alteração do formato das **grelhas de insuflamento** e, conseqüentemente, o método de injeção de agente gaseificante.
- Estudar a viabilidade de utilização de **placa(s) defletora(s)** internamente ao escoamento a fim de favorecer determinadas reações químicas.
- Comparação do modelo com o mesmo modelo produzido em outros softwares, sobretudo softwares pagos. Uma vez que o OpenFOAM é constantemente desenvolvido pela comunidade de usuários, tal comparação permite análise aprofundada dos resultados em termos da implementação numérica, diferença entre modelos utilizados; além da possibilidade de identificação de falhas, lacunas e bugs quando da modelagem computacional.
- Implementação dos demais fenômenos da gaseificação em leito fluidizado, como o **shrinkage**.
- Implementação de **densidade da biomassa variável**. A mesma pode ser feita acrescentando-se uma equação de transporte de densidade, que varia conforme as reações químicas acontecem, transformando a partícula de biomassa em um meio virtualmente poroso.
- Aplicar métodos de **otimização** para melhor automatização para o desenvolvimento de um modelo CFD auto adaptável a diferentes tipos de biomassa, condições de operação e geometria de reatores.
- Desenvolvimento de **script de programação** para montagem de casos e/ou rotinas de simulação autônoma da operação real, mesclando estados numérico-computacionais para diferentes condições de operação (ex.: injeção de vapor aos 5 s, inertização da atmosfera interna com N₂).

CAPÍTULO VI

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ADNAN, M.; SUN, J.; AHMAD, N.; WEI, J. J. Comparative CFD modeling of a bubbling bed using a Eulerian–Eulerian two-fluid model (TFM) and a Eulerian-Lagrangian dense discrete phase model (DDPM). **Powder Technology**, v. 383, p. 418–442, 1 maio 2021. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2021.01.063>.
- AJORLOO, M.; GHODRAT, M.; SCOTT, J.; STREZOV, V. **Recent advances in thermodynamic analysis of biomass gasification: A review on numerical modelling and simulation** *Journal of the Energy Institute* Elsevier B.V., , 1 jun. 2022. <https://doi.org/10.1016/j.joei.2022.05.003>.
- ÁLVAREZ-BERMÚDEZ, C.; ANCA-COUCÉ, A.; CHAPELA, S.; SCHARLER, R.; BUCHMAYR, M.; GÓMEZ, M. Á.; PORTEIRO, J. Validation of a biomass conversion mechanism by Eulerian modelling of a fixed-bed system under low primary air conditions. **Renewable Energy**, v. 215, n. July, p. 19–21, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2023.119003>.
- AMARO, J.; ROSADO, D. J. M.; MENDIBURU, A. Z.; DOS SANTOS, L. R.; DE CARVALHO, J. A. Modeling of syngas composition obtained from fixed bed gasifiers using Kuhn–Tucker multipliers. **Fuel**, v. 287, 1 mar. 2021. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.119068>.
- ARENA, U. Process and technological aspects of municipal solid waste gasification. A review. **Waste Management**, v. 32, n. 4, p. 625–639, abr. 2012. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2011.09.025>.
- ARENA, U.; ZACCARIELLO, L.; MASTELLONE, M. L. Fluidized bed gasification of waste-derived fuels. **Waste Management**, v. 30, n. 7, p. 1212–1219, 2010. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2010.01.038>.
- ASKARIPOUR, H. CFD modeling of gasification process in tapered fluidized bed gasifier. **Energy**, v. 191, n. 1, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2019.116515>.
- ASTM. **D5865/D5865M – 19 Standard Test Method for Gross Calorific Value of Coal and Coke**. [s.l.: s.n.]. Disponível em: <www.astm.org>. <https://doi.org/10.1520/D5865>.
- BAN, S.; SHRESTHA, R.; CHAUDHARY, Y.; JEON, J.-K.; JOSHI, R.; UPRETY, B. Process simulation and economic analysis of dolomite catalyst based biodiesel production from Nepalese Jatropha Curcas. **Cleaner Chemical Engineering**, v. 2, n. March, p. 100029, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.clce.2022.100029>.
- BASU, P. **Combustion and Gasification in Fluidized Beds**. [s.l.] Taylor & Francis, 2006.
- BASU, P. **Biomass gasification and pyrolysis: practical design and theory**. [s.l.] Academic Press, 2010.
- BORELLI, D.; DEVIA, F.; SCHENONE, C.; SILENZI, F.; SOLLAI, F.; TAGLIAFICO, L. A. Assessing environmental benefits of the transition from standard fossil fuels to liquefied natural gas: The Sardinia Region case study. **Energy for Sustainable Development**, v. 73, p. 205–217, 1 abr. 2023. <https://doi.org/10.1016/j.esd.2023.01.008>.

- CASTILLO SANTIAGO, Y.; MARTÍNEZ GONZÁLEZ, A.; VENTURINI, O. J.; YEPES MAYA, D. M. Assessment of the energy recovery potential of oil sludge through gasification aiming electricity generation. **Energy**, v. 215, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2020.119210>.
- CASTILLO SANTIAGO, Y.; PÉREZ, J. F.; SPHAIER, L. A. Reaction-front and char characterization from a palm kernel shell – Oil sludge mixture under oxygen lean regimes in a fixed-bed gasifier. **Fuel**, v. 333, 1 fev. 2023. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.126402>.
- CHASE, M. W. NIST-JANAF Thermochemical Tables. v. 44, p. 91303, 1971.
- CHASE, M. W. **NIST-JANAF Thermochemical Tables, 4th Ed. J. Phys. Chem. Ref. Data. 1998, Monograph 9(Part I and Part II)Journal of Physical and Chemical Reference Data**, 1998.
- CHEN, X.; XIE, J.; MEI, S.; HE, F. NO_x and SO₂ emissions during co-combustion of rdf and anthracite in the environment of precalciner. **Energies**, v. 11, n. 2, 2018. <https://doi.org/10.3390/en11020337>.
- CHO, I.; YANG, C.; KWON, H.; BANG, B.; JEONG, S.; LEE, U. Numerical simulation method of a circulating fluidized bed reactor using a modified MP-PIC solver of OpenFOAM. **Powder Technology**, v. 409, n. April, p. 117815, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2022.117815>.
- COLPANI, D.; SANTOS, V. O.; ARAUJO, R. O.; LIMA, V. M. R.; TENÓRIO, J. A. S.; COLETI, J.; CHAAR, J. S.; DE SOUZA, L. K. C. Bioenergy potential analysis of Brazil nut biomass residues through pyrolysis: Gas emission, kinetics, and thermodynamic parameters. **Cleaner Chemical Engineering**, v. 1, n. December 2021, p. 100002, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.clce.2022.100002>.
- COMITÉ BRASILEIRO DE MINERAÇÃO E METALURGIA; COMISSÃO DE ESTUDO DE ENSAIO DE CARVÃO MINERAL. **NBR 8289. CARVÃO MINERAL DETERMINAÇÃO DO TEOR DE CINZAS. Método de Ensaio.** [s.l: s.n.].
- COPA REY, J. R.; TAMAYO PACHECO, J. J.; ANTÔNIO DA CRUZ TARELHO, L.; SILVA, V.; CARDOSO, J. S.; SILVEIRA, J. L.; TUNA, C. E. Evaluation of cogeneration alternative systems integrating biomass gasification applied to a Brazilian sugar industry. **Renewable Energy**, v. 178, p. 318–333, 1 nov. 2021. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2021.06.053>.
- COUTO, N.; SILVA, V. B.; BISPO, C.; ROUBOA, A. From laboratorial to pilot fluidized bed reactors: Analysis of the scale-up phenomenon. **Energy Conversion and Management**, v. 119, p. 177–186, 1 jul. 2016. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2016.03.085>.
- CRUZ, O. Brazilian Journal of Chemical Engineering Removal of SO₂ with particles of dolomite limestone powder in a binary fluidized bed reactor with bubbling fluidization. v. 2, p. 1–10, 2018.
- DA SILVA, V. M. **DESENVOLVIMENTO E VALIDAÇÃO DE MÉTODO CROMATOGRÁFICO PARA DETERMINAÇÃO DE GASES SINTETIZADOS A PARTIR DE COMBUSTÍVEL DERIVADO DE RESÍDUO SÓLIDO URBANO GERADOS DURANTE O PROCESSO DE PIRÓLISE.** Uberlândia: Universidade Federal de Uberlândia, 2021.
- DAS, B.; BHATTACHARYA, A.; DATTA, A. Kinetic modeling of biomass gasification and tar formation in a fluidized bed gasifier using equivalent reactor network (ERN). **Fuel**, v. 280, n. April, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.118582>.
- DE ALMEIDA NEUWALD, O.; BORGHETTI, M.; PERONDI, D.; HILLIG, É.; GODINHO, M. Steam catalytic gasification of elephant grass pellets. **Process Safety and Environmental Protection**, v. 162, p. 620–630, 1 jun. 2022. <https://doi.org/10.1016/j.psep.2022.04.019>.
- DÍAZ GONZÁLEZ, C. A.; DE OLIVEIRA, D. C.; YEPES, D. M.; PACHECO, L. E.; SILVA, E. E. Aspen Plus model of a downdraft gasifier for lignocellulosic biomass adjusted by Principal Component Analysis. **Energy Conversion and Management**, v. 296, 15 nov. 2023. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2023.117570>.

- DING, K.; XIONG, Q.; ZHONG, Z.; ZHONG, D.; ZHANG, Y. CFD simulation of combustible solid waste pyrolysis in a fluidized bed reactor. **Powder Technology**, v. 362, p. 177–187, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2019.12.011>.
- DIYOKE, C.; GAO, N.; ANEKE, M.; WANG, M.; WU, C. Modelling of down-draft gasification of biomass – An integrated pyrolysis, combustion and reduction process. **Applied Thermal Engineering**, v. 142, p. 444–456, 1 set. 2018. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2018.06.079>.
- DO NASCIMENTO, B. F.; DE ARAUJO, C. M. B.; DO NASCIMENTO, A. C.; DA SILVA, F. L. H.; DE MELO, D. J. N.; JAGUARIBE, E. F.; LIMA CAVALCANTI, J. V. F.; DA MOTTA SOBRINHO, M. A. Detoxification of sisal bagasse hydrolysate using activated carbon produced from the gasification of açai waste. **Journal of Hazardous Materials**, v. 409, 5 maio 2021. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2020.124494>.
- DOVICH FILHO, F. B.; LORA, E. E. S.; PALACIO, J. C. E.; VENTURINI, O. J.; JAÉN, R. L. An approach to technology selection in bioelectricity technical potential assessment: A Brazilian case study. **Energy**, v. 272, 1 jun. 2023. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2023.126995>.
- DYMALA, T.; WYTRWAT, T.; HEINRICH, S. MP-PIC simulation of circulating fluidized beds using an EMMS based drag model for Geldart B particles. **Particuology**, v. 59, n. xxxx, p. 76–90, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.partic.2021.07.002>.
- EL TAHRY, S. H. k- epsilon EQUATION FOR COMPRESSIBLE RECIPROCATING ENGINE FLOWS. **Journal of energy**, v. 7, n. 4, p. 345–353, 1983. <https://doi.org/10.2514/3.48086>.
- ELGHOBASHI, S. **On Predicting Particle-Laden Turbulent Flows*** **Applied Scientific Research**. [s.l: s.n.].
- ERDIWANSYAH; GANI, A.; ZAKI, M.; MAMAT, R.; NIZAR, M.; ROSDI, S. M.; YANA, S.; SARJONO, R. E. Analysis of technological developments and potential of biomass gasification as a viable industrial process: A review. **Case Studies in Chemical and Environmental Engineering**, v. 8, n. July, p. 100439, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.cscee.2023.100439>.
- ERGUN, S. Fluid Flow through Packed Columns. 1952.
- FAN, F.; ZHENG, M.; YANG, S.; WANG, H. Numerical study of fluid dynamics and heat transfer property of dual fluidized bed gasifier. **Energy**, v. 234, 1 nov. 2021. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2021.121246>.
- FAN, X.; YANG, L.; JIANG, J. Experimental study on industrial-scale CFB biomass gasification. **Renewable Energy**, v. 158, p. 32–36, 1 out. 2020. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2020.05.145>.
- FERRAZ DE CAMPOS, V. A.; SILVA, V. B.; CARDOSO, J. S.; BRITO, P. S.; TUNA, C. E.; SILVEIRA, J. L. A review of waste management in Brazil and Portugal: Waste-to-energy as pathway for sustainable development. **Renewable Energy**, v. 178, p. 802–820, 1 nov. 2021. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2021.06.107>.
- FERREIRA, C.; FERREIRA, C.; INFIESTA, L.; MONTEIRO, V. Experimental data from a gasification pilot plant and thermochemical analysis of a fluidized bed reactor for energy generation using municipal refuse-derived fuel. **Journal of Cleaner Production**, 2020.
- FERREIRA, C. R. N.; INFIESTA, L. R.; MONTEIRO, V. A. L.; STARLING, M. C. V. M.; DA SILVA JÚNIOR, W. M.; BORGES, V. L.; CARVALHO, S. R.; TROVÓ, A. G. Gasification of municipal refuse-derived fuel as an alternative to waste disposal: Process efficiency and thermochemical analysis. **Process Safety and Environmental Protection**, v. 149, n. 1, p. 885–893, 2021a. <https://doi.org/10.1016/j.psep.2021.03.041>.
- FERREIRA, C. R. N. **PROJETO DE LINHA INDUSTRIAL PARA O PROCESSAMENTO DE RESÍDUOS SÓLIDOS URBANOS E PRODUÇÃO DE COMBUSTÍVEL DERIVADO DE RESÍDUOS PARA A GASEIFICAÇÃO EM REATOR TERMOQUÍMICO: ANÁLISE EXPERIMENTAL DO SYNGAS PARA A PRODUÇÃO DE ENERGIA TÉRMICA E**

- ELÉTRICA.** [s.l.] Universidade Federal de Uberlândia, 2021. <https://doi.org/http://doi.org/10.14393/ufu.te.2021.5541>.
- FERREIRA, C. R. N.; INFIESTA, L. R.; MONTEIRO, V. A. L.; STARLING, M. C. V. M.; DA SILVA JÚNIOR, W. M.; BORGES, V. L.; CARVALHO, S. R.; TROVÓ, A. G. Gasification of municipal refuse-derived fuel as an alternative to waste disposal: Process efficiency and thermochemical analysis. **Process Safety and Environmental Protection**, v. 149, p. 885–893, 2021b. <https://doi.org/10.1016/j.psep.2021.03.041>.
- FERREIRA DE OLIVEIRA LEITE, F.; ESCOBAR PALACIO, J. C.; ARCANJO BATISTA, M. J.; GRILLO RENÓ, M. L. Evaluation of technological alternatives for the treatment of urban solid waste: A case study of Minas Gerais, Brazil. **Journal of Cleaner Production**, v. 330, 1 jan. 2022. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2021.129618>.
- GERBER, S.; BEHRENDT, F.; OEVERMANN, M. An Eulerian modeling approach of wood gasification in a bubbling fluidized bed reactor using char as bed material. **Fuel**, v. 89, n. 10, p. 2903–2917, 2010. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2010.03.034>.
- GIDASPOW, D. **Multiphase Flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Descriptions**. [s.l: s.n.].
- GIDASPOW, D. **One-Dimensional Steady Gas–Solid Flow**. [s.l: s.n.].
- GÓMEZ-BAREA, A.; LECKNER, B. **Modeling of biomass gasification in fluidized bed** **Progress in Energy and Combustion Science** Elsevier Ltd, , 2010. <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2009.12.002>.
- GUPTA, S.; CHOUDHARY, S.; KUMAR, S.; DE, S. Large eddy simulation of biomass gasification in a bubbling fluidized bed based on the multiphase particle-in-cell method. **Renewable Energy**, v. 163, p. 1455–1466, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2020.07.127>.
- HAGHGOO, M. R.; BERGSTROM, D. J.; SPITERI, R. J. Effect of particle stress tensor in simulations of dense gas–particle flows in fluidized beds. **Particuology**, v. 38, p. 31–43, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.partic.2017.04.010>.
- HAYDARY, J.; RAPČANOVÁ, E.; ŠKULEC, M. Purification of syngas from Refuse-Derived Fuel (RDF) gasification: Techno-economic analysis. **Thermal Science and Engineering Progress**, v. 44, 1 set. 2023. <https://doi.org/10.1016/j.tsep.2023.102024>.
- HEIDENREICH, S.; MÜLLER, M.; FOSCOLO, P. U. **Advanced Biomass Gasification: New Concepts for Efficiency Increase and Product Flexibility**. [s.l: s.n.].
- HWANG, I. S.; SOHN, J.; LEE, U. DO; HWANG, J. CFD-DEM simulation of air-blown gasification of biomass in a bubbling fluidized bed gasifier: Effects of equivalence ratio and fluidization number. **Energy**, v. 219, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2020.119533>.
- INFIESTA, L.; INFIESTA JR., R. **APROVEITAMENTO ENERGÉTICO E GERAÇÃO DE ENERGIA ELÉTRICA DE RESÍDUOS SÓLIDOS URBANOS A PARTIR DE REATOR TERMOQUÍMICO CARBOGAS ENERGIA. RIJ-04G-LFC-00-03-00**. Boa esperança-MG: [s.n.].
- INFIESTA, L. R.; FERREIRA, C. R. N.; TROVÓ, A. G.; BORGES, V. L.; CARVALHO, S. R. Design of an industrial solid waste processing line to produce refuse-derived fuel. **Journal of Environmental Management**, v. 236, n. 1, p. 715–719, 2019a. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2019.02.017>.
- INFIESTA, L. R.; FERREIRA, C. R. N.; TROVÓ, A. G.; BORGES, V. L.; CARVALHO, S. R. Design of an industrial solid waste processing line to produce refuse-derived fuel. **Journal of Environmental Management**, v. 236, p. 715–719, 15 abr. 2019b. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2019.02.017>.
- JAKOBSEN, H. A. **Chemical Reactor Modeling - Multiphase Reactive Flows**. Verlag Berlin Heidelberg: Springer, 2008.
- JIN, H.; YIN, W.; WANG, S.; WANG, L. Influence of bed material on biomass gasification in fluidized beds via a TFM-DEM hybrid model. **International Journal of Hydrogen Energy**, 2 jan. 2023. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.07.235>.

- JONES, W. P.; LINDSTEDT, R. P. **Global Reaction Schemes for Hydrocarbon Combustion**. **COMBUSTION AND FLAME**. [s.l.: s.n.].
- KADYROV, T.; LI, F.; ULLAH, A. Considering solid shear stress in MP-PIC simulation of a CFB riser. **Particuology**, v. 89, p. 79–87, 1 jun. 2024. <https://doi.org/10.1016/J.PARTIC.2023.10.013>.
- KHAN, Z.; YUSUP, S.; ASLAM, M.; INAYAT, A.; SHAHBAZ, M.; RAZA NAQVI, S.; FAROOQ, R.; WATSON, I. NO and SO₂ emissions in palm kernel shell catalytic steam gasification with in-situ CO₂ adsorption for hydrogen production in a pilot-scale fluidized bed gasification system. **Journal of Cleaner Production**, v. 236, n. x, p. 117636, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2019.117636>.
- KLIMANEK, A.; BIGDA, J. CFD modelling of CO₂ enhanced gasification of coal in a pressurized circulating fluidized bed reactor. **Energy**, v. 160, p. 710–719, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2018.07.046>.
- KONG, D.; WANG, S.; LUO, K.; HU, C.; LI, D.; FAN, J. Three-dimensional simulation of biomass gasification in a full-loop pilot-scale dual fluidized bed with complex geometric structure. **Renewable Energy**, v. 157, p. 466–481, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2020.04.130>.
- KOPPATZ, S.; PFEIFER, C.; HOFBAUER, H. Comparison of the performance behaviour of silica sand and olivine in a dual fluidised bed reactor system for steam gasification of biomass at pilot plant scale. **Chemical Engineering Journal**, v. 175, n. 1, p. 468–483, 2011. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2011.09.071>.
- KU, X.; LI, T.; LØVÅS, T. CFD–DEM simulation of biomass gasification with steam in a fluidized bed reactor. **Chemical Engineering Science**, v. 122, p. 270–283, 7 jan. 2015. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2014.08.045>.
- KUNII, D.; LEVENSPIEL, OCTAVE. **Fluidization engineering**. [s.l.] Butterworth-Heinemann, 1991.
- LA PICIRELLI DE SOUZA, L.; RAJABI HAMEDANI, S.; SILVA LORA, E. E.; ESCOBAR PALACIO, J. C.; COMODI, G.; VILLARINI, M.; COLANTONI, A. Theoretical and technical assessment of agroforestry residue potential for electricity generation in Brazil towards 2050. **Energy Reports**, v. 7, p. 2574–2587, 1 nov. 2021. <https://doi.org/10.1016/j.egyr.2021.04.026>.
- LAMAS, G. C.; CHAVES, B. S.; PAULO DE OLIVEIRA RODRIGUES, P.; DA SILVA GONZALES, T.; BARBOSA, T.; ROUSSET, P.; GHESTI, G. F.; SILVEIRA, E. A. Effect of torrefaction on steam-enhanced co-gasification of an urban forest and landfill waste blend: H₂ production and CO₂ emissions mitigation. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 48, n. 70, p. 27151–27169, 15 ago. 2023. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.03.367>.
- LANGNER, E.; KALTENMORGEN, J.; HEINZE, C.; STRÖHLE, J.; EPPLE, B. Fluidized bed gasification of solid recovered fuels in a 500 kWth pilot plant. **Fuel**, v. 344, 15 jul. 2023. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2023.127901>.
- LAUNDER, B. E.; SPALDING, D. B. **THE NUMERICAL COMPUTATION OF TURBULENT FLOWSCOMPUTER METHODS IN APPLIED MECHANICS ANR ENGINEERING**. [s.l.: s.n.].
- LAZZAROTTO, I. P.; FERREIRA, S. D.; JUNGES, J.; BASSANESI, G. R.; MANERA, C.; PERONDI, D.; GODINHO, M. The role of CaO in the steam gasification of plastic wastes recovered from the municipal solid waste in a fluidized bed reactor. **Process Safety and Environmental Protection**, v. 140, p. 60–67, 1 ago. 2020. <https://doi.org/10.1016/j.psep.2020.04.009>.
- LIU, Q.; SUN, J.; MENG, Z.; ZHONG, W. Gasification characteristics of refuse derived fuels in a fluidized bed: Effect of process parameters and catalytic reforming. **Journal of the Energy Institute**, v. 111, n. August, p. 101435, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.joei.2023.101435>.

- LOPES, E. J.; QUEIROZ, N.; YAMAMOTO, C. I.; DA COSTA NETO, P. R. Evaluating the emissions from the gasification processing of municipal solid waste followed by combustion. **Waste Management**, v. 73, p. 504–510, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2017.12.019>.
- LOPES, E. J.; OKAMURA, L. A.; YAMAMOTO, C. I. Formation of dioxins and furans during municipal solid waste gasification. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, v. 32, n. 1, p. 87–97, 1 jan. 2015. <https://doi.org/10.1590/0104-6632.20150321s00003163>.
- LOPES SILVA, M.; CELINA LANGE, L. CARACTERIZAÇÃO DAS CINZAS DE INCINERAÇÃO DE RESÍDUOS INDUSTRIAIS E DE SERVIÇOS DE SAÚDE. **Quim. Nova**, v. 31, n. 2, p. 199–203, 2008.
- LOPEZ, G.; ARTETXE, M.; AMUTIO, M.; ALVAREZ, J.; BILBAO, J.; OLAZAR, M. Recent advances in the gasification of waste plastics. A critical overview. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 82, n. September 2017, p. 576–596, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.09.032>.
- LUN, C. K. K.; SAVAGE, S. B.; JEFFREY A N, D. J. **Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield**. **J. Fluid Mech.** [s.l: s.n.].
- MACHIN, E. B.; PEDROSO, D. T.; MACHÍN, A. B.; ACOSTA, D. G.; SILVA DOS SANTOS, M. I.; SOLFERINI DE CARVALHO, F.; PÉREZ, N. P.; PASCUAL, R.; DE CARVALHO JÚNIOR, J. A. Biomass integrated gasification-gas turbine combined cycle (BIG/GTCC) implementation in the Brazilian sugarcane industry: Economic and environmental appraisal. **Renewable Energy**, v. 172, p. 529–540, 1 jul. 2021. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2021.03.074>.
- MAKWANA, J.; DHASS, A. D.; RAMANA, P. V.; SAPARIYA, D.; PATEL, D. An analysis of waste/biomass gasification producing hydrogen-rich syngas: A review. **International Journal of Thermofluids**, v. 20, n. October, p. 100492, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.ijft.2023.100492>.
- MANU, J.; KAILAS, T. G.; MADAV, V. Exploring the synergetic effects of rice husk, cashew shell, and cashew husk biomass blends on fluidized bed gasification for enhanced hydrogen production. **Journal of Cleaner Production**, v. 419, n. February, p. 137991, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2023.137991>.
- MATERAZZI, M.; LETTIERI, P.; TAYLOR, R.; CHAPMAN, C. Performance analysis of RDF gasification in a two stage fluidized bed-plasma process. **Waste Management**, v. 47, p. 256–266, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2015.06.016>.
- MAVUKWANA, A. E.; STACEY, N.; FOX, J. A.; SEMPUGA, B. C. Thermodynamic comparison of pyrolysis and gasification of waste tyres. **Journal of Environmental Chemical Engineering**, v. 9, n. 2, 1 abr. 2021. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2021.105163>.
- MBIÉ, M. J.; MARSON, E. O.; TROVÓ, A. G.; BORGES, V. L.; DOS, M. B.; SOLIDÔNIO, S.; DE CARVALHO, R. **COB-2023-0687 GASIFICATION OF SMUGGLED AND SEIZED CIGARETTES FOR SYNTHESIS GAS AND ENERGY PRODUCTION**. 27th ABCM International Congress of Mechanical Engineering: [s.n.].
- MONTEIRO, A. L.; ALVES DOS REIS, G.; REIS INFUESTA, L.; RODRIGUES DE CARVALHO, S. DEVOLATILIZATION EULERIAN EVALUATION OF BIOMASS GASIFICATION IN FLUIDIZED BED REACTOR USING OPENFOAM. **8th Brazilian combustion and Institute Summer School of Combustion**, v. 122, 18 out. 2021a.
- MONTEIRO, V.; DOS REIS, M.; REIS INFUESTA, L.; RODRIGUES DE CARVALHO, S. EULERIAN-EULERIAN CFD SIMULATION OF BIOMASS DEVOLATILIZATION IN FLUIDIZED BED REACTOR FOR GASIFICATION. **COBEM 2021 26th ABCM international Congress of Mechanical Engineering**, p. 1–9, 2021b.
- MONTEIRO, V.; MAURÍCIO, DOS R.; REIS INFUESTA, L.; RODRIGUES DE CARVALHO, S. SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE DEVOLATILIZAÇÃO DE BIOMASSA EM REATOR DE GASEIFICAÇÃO EM LEITO FLUIDIZADO BORBULHANTE. **30º Simpósio do programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica**, p. 1–5, 2021c.

- MONTEIRO, V. A. L. Modelagem termodinâmica de gás de síntese de combustível derivado de resíduos sólidos urbanos com simulações em ciclos de potência a gás e vapor. p. 129, 2019.
- MONTEIRO, V. A. L.; REIS, M. G. A.; INFIESTA, L. R.; FERREIRA, C. R. N.; DOS SANTOS, M. B.; TROVÓ, A. G.; CARVALHO, S. R. Eulerian computational fluidisation modelling using OpenFOAM applied to a semi-industrial fluidised bed reactor and pilot plant application. **Cleaner Chemical Engineering**, v. 5, n. December 2022, p. 100089, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.clce.2022.100089>.
- MOTTA, I. L.; MIRANDA, N. T.; MACIEL FILHO, R.; WOLF MACIEL, M. R. Sugarcane bagasse gasification: Simulation and analysis of different operating parameters, fluidizing media, and gasifier types. **Biomass and Bioenergy**, v. 122, n. March 2018, p. 433–445, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2019.01.051>.
- MOTTA, I. L.; MARCHESAN, A. N.; MACIEL FILHO, R.; WOLF MACIEL, M. R. Correlating biomass properties, gasification performance, and syngas applications of Brazilian feedstocks via simulation and multivariate analysis. **Industrial Crops and Products**, v. 181, 1 jul. 2022. <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2022.114808>.
- MOURA, C. P. C.; DE ARAUJO FILHO, M. A.; VILLARDI, H. G. D.; CAVALCANTE, R. M.; YOUNG, A. F. Process simulation and economic evaluation of an integrated production plant for methanol, acetic acid and DME synthesis via sugarcane bagasse gasification. **Energy Conversion and Management**, v. 286, 15 jun. 2023. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2023.117051>.
- MUKHERJEE, A.; DEBNATH, B.; GHOSH, S. K. A Review on Technologies of Removal of Dioxins and Furans from Incinerator Flue Gas. **Procedia Environmental Sciences**, v. 35, p. 528–540, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.proenv.2016.07.037>.
- MUSSER, J.; SYAMLAL, M.; SHAHNAM, M.; HUCKABY, D. Constitutive equation for heat transfer caused by mass transfer. **Chemical Engineering Science**, v. 123, p. 436–443, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2014.11.036>.
- NAKHAEI, M.; LU, B.; TIAN, Y.; WANG, W.; DAM-JOHANSEN, K.; WU, H. **CFD modeling of gas-solid cyclone separators at ambient and elevated temperatures** ProcessesMDPI AG, , 1 fev. 2020. <https://doi.org/10.3390/pr8020228>.
- NBR 8293. **CARVÃO MINERAL DETERMINAÇÃO DE UMIDADE. Método de Ensaio**. [s.l.: s.n.].
- NISAMANEENATE, J.; ATONG, D.; SEEMEN, A.; SRICHAROENCHAIKUL, V. Mitigating bed agglomeration in a fluidized bed gasifier operating on rice straw. **Energy Reports**, v. 6, p. 275–285, 1 nov. 2020. <https://doi.org/10.1016/j.egy.2020.08.050>.
- NJUGUNA, F. I.; NDIRITU, H. M.; GATHITU, B. B.; HAWI, M.; MUNYALO, J. M. Experimental investigation and optimization of the gasification parameters of macadamia nutshells in a batch-fed bubbling fluidized bed gasifier with air preheating. **Energy Storage and Saving**, dez. 2023. <https://doi.org/10.1016/j.enss.2023.07.001>.
- NOBRE, C.; LONGO, A.; VILARINHO, C.; GONÇALVES, M. Gasification of pellets produced from blends of biomass wastes and refuse derived fuel chars. **Renewable Energy**, v. 154, p. 1294–1303, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2020.03.077>.
- ORÍO, A.; CORELLA, J.; NARVÁEZ, I. Performance of Different Dolomites on Hot Raw Gas Cleaning from Biomass Gasification with Air. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 36, n. 9, p. 3800–3808, 1997. <https://doi.org/10.1021/ie960810c>.
- OVADIA, O.; KAHANA, A.; TURKEL, E.; DEKEL, S. Beyond the Courant-Friedrichs-Lewy condition: Numerical methods for the wave problem using deep learning. **Journal of Computational Physics**, v. 442, 1 out. 2021. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2021.110493>.
- PARK, S. J.; SON, S. H.; KOOK, J. W.; RA, H. W.; YOON, S. J.; MUN, T. Y.; MOON, J. H.; YOON, S. M.; KIM, J. H.; KIM, Y. K.; LEE, J. G.; LEE, D. Y.; SEO, M. W. Gasification operational characteristics of 20-tons-Per-Day rice husk fluidized-bed reactor. **Renewable Energy**, v. 169, p. 788–798, 1 maio 2021. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2021.01.045>.

- PASSALACQUA, A.; MARMO, L. A critical comparison of frictional stress models applied to the simulation of bubbling fluidized beds. **Chemical Engineering Science**, v. 64, n. 12, p. 2795–2806, 15 jun. 2009. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2009.03.005>.
- PASSOS, M. L.; BARROZO, M. A. S.; MUJUMDAR, ARUN. S. **Fluidization Engineering - Practice**. Second Exp ed. Laval, Canada: [s.n.]. v. 53
- PATIL, A. V.; PETERS, E. A. J. F.; KUIPERS, J. A. M. Comparison of CFD-DEM heat transfer simulations with infrared/visual measurements. **Chemical Engineering Journal**, v. 277, p. 388–401, 1 out. 2015. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2015.04.131>.
- PAULINO, R. F. S.; ESSIPTCHOUK, A. M.; COSTA, L. P. C.; SILVEIRA, J. L. Thermodynamic analysis of biomedical waste plasma gasification. **Energy**, v. 244, 1 abr. 2022. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2021.122600>.
- PAULINO, R. F. S.; ESSIPTCHOUK, A. M.; SILVEIRA, J. L. **The use of syngas from biomedical waste plasma gasification systems for electricity production in internal combustion: Thermodynamic and economic issues** Elsevier Ltd, , 15 maio 2020. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2020.117419>.
- PIO, D. T.; TARELHO, L. A. C. Industrial gasification systems (>3 MWth) for bioenergy in Europe: Current status and future perspectives. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 145, n. May, p. 111108, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2021.111108>.
- QI, T.; LEI, T.; YAN, B.; CHEN, G.; LI, Z.; FATEHI, H.; WANG, Z.; BAI, X. S. Biomass steam gasification in bubbling fluidized bed for higher-H₂ syngas: CFD simulation with coarse grain model. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 44, n. 13, p. 6448–6460, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.01.146>.
- RAMAKRISHNAN, P.; SINGH, J. K.; SAHOO, A.; MOHAPATRA, S. S. CFD simulation for coal gasification in fluidized bed gasifier. **Energy**, v. 281, 15 out. 2023. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2023.128272>.
- RAMOS, A.; MONTEIRO, E.; SILVA, V.; ROUBOA, A. Co-gasification and recent developments on waste-to-energy conversion: A review. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 81, n. June 2016, p. 380–398, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.07.025>.
- RANJAN, N.; YADAV, N.; SINGH, H.; KUMAR, S.; MAHAJANI, S. M. Modelling and simulation of autothermal downdraft co-gasification of biomass and plastic wastes using Aspen Plus. **Energy Conversion and Management**, v. 297, 1 dez. 2023. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2023.117714>.
- RANZ, W. E.; MARSHALL, W. R. Evaporation from drops. **Chem. Eng. Progr**, v. 48, n. 22, p. 141–173, 1952.
- RAO, B. J. M.; BARMAN, M. Thermal gasification of biomass in fluidized bed. **Materials Today: Proceedings**, ago. 2023. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2023.08.265>.
- REAL GUIMARÃES, H.; MARCON BRESSANIN, J.; LOPES MOTTA, I.; FERREIRA CHAGAS, M.; COLLING KLEIN, B.; BONOMI, A.; MACIEL FILHO, R.; DJUN BARBOSA WATANABE, M. Bottlenecks and potentials for the gasification of lignocellulosic biomasses and Fischer-Tropsch synthesis: A case study on the production of advanced liquid biofuels in Brazil. **Energy Conversion and Management**, v. 245, 1 out. 2021. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2021.114629>.
- RITVANEN, J.; MYÖHÄNEN, K.; PITKÄOJA, A.; HYPPÄNEN, T. Modeling of industrial-scale sorption enhanced gasification process: One-dimensional simulations for the operation of coupled reactor system. **Energy**, v. 226, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2021.120387>.
- RODRIGUES, J. P.; GHESTI, G. F.; SILVEIRA, E. A.; LAMAS, G. C.; FERREIRA, R.; COSTA, M. Waste-to-hydrogen via CO₂/Steam-enhanced gasification of spent coffee ground. **Cleaner Chemical Engineering**, v. 4, n. October, p. 100082, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.clce.2022.100082>.

- SASIC, S.; LECKNER, B.; JOHNSON, F. Time-frequency investigation of different modes of bubble flow in a gas-solid fluidized bed. **Chemical Engineering Journal**, v. 121, n. 1, p. 27–35, 2006. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2006.05.005>.
- SCHAEFER, D. G. **instability in the Evolution Equations Describing Incompressible Granular Flow** JOURNAL OF DIFFERENTIAL EQUATIONS. [s.l.: s.n.].
- SEZER, S.; ÖZVEREN, U. Investigation of syngas exergy value and hydrogen concentration in syngas from biomass gasification in a bubbling fluidized bed gasifier by using machine learning. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 46, n. 39, p. 20377–20396, 17 jun. 2021. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.03.184>.
- SHAO, Y.; GU, J.; ZHONG, W.; YU, A. Determination of minimum fluidization velocity in fluidized bed at elevated pressures and temperatures using CFD simulations. **Powder Technology**, v. 350, p. 81–90, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2019.03.039>.
- SHI, H.; KOMRAKOVA, A.; NIKRITYUK, P. Fluidized beds modeling: Validation of 2D and 3D simulations against experiments. **Powder Technology**, v. 343, p. 479–494, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.11.043>.
- SILVA, V. M.; FILHO, J. S. P.; SOUSA, R. M. F.; CARVALHO, S. R.; BORGES, V. L.; FERREIRA, C. R. N.; STARLING, M. C. V. M.; TROVÓ, A. G. A gas chromatography method for simultaneous quantification of inorganic gases and light hydrocarbons generated in thermochemical processes. **Journal of the Brazilian Chemical Society**, v. 32, n. 6, p. 1143–1150, 2021. <https://doi.org/10.21577/0103-5053.20210015>.
- SINCLAIR, J. L.; JACKSON, R. Gas-Particle Flow in a Vertical Pipe with Particle-Particle Interactions. **AIChE Journal**, v. 35, p. 1473–1486, 1989.
- SINGH, V.; NEMALIPURI, P.; VITANKAR, V.; DAS, H. C. Multifluid computational fluid dynamics simulation for sawdust gasification inside an industrial scale fluidized bed gasifier. **Materials Today: Proceedings**, jun. 2023. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2023.06.258>.
- SMITH LEWIN, C.; FONSECA DE AGUIAR MARTINS, A. R.; PRADELLE, F. Modelling, simulation and optimization of a solid residues downdraft gasifier: Application to the co-gasification of municipal solid waste and sugarcane bagasse. **Energy**, v. 210, 1 nov. 2020. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2020.118498>.
- SOLER, A.; CONESA, J. A.; IÑIGUEZ, M. E.; ORTUÑO, N. Pollutant formation in the pyrolysis and combustion of materials combining biomass and e-waste. **Science of the Total Environment**, v. 622–623, p. 1258–1264, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2017.12.068>.
- SONG, T.; WU, J.; SHEN, L.; XIAO, J. Experimental investigation on hydrogen production from biomass gasification in interconnected fluidized beds. **Biomass and Bioenergy**, v. 36, p. 258–267, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2011.10.021>.
- STEVEN, S.; RESTIAWATY, E.; BINDAR, Y. **Simple mass transfer simulation using a single-particle heterogeneous reaction approach in rice husk combustion and rice husk ash extraction**. IOP Conference Series: Earth and Environmental Science. **Anais...IOP Publishing Ltd**, 19 jan. 2022. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/963/1/012050>.
- SUBRAMANI, H. J.; MOTHIVEL BALAIYYA, M. B.; MIRANDA, L. R. Minimum fluidization velocity at elevated temperatures for Geldart's group-B powders. **Experimental Thermal and Fluid Science**, v. 32, n. 1, p. 166–173, 2007. <https://doi.org/10.1016/j.expthermflusci.2007.03.003>.
- SUN, H.; BAO, G.; YANG, S.; HU, J.; WANG, H. Numerical study of the biomass gasification process in an industrial-scale dual fluidized bed gasifier with 8MWth input. **Renewable Energy**, v. 211, n. October 2022, p. 681–696, 2023a. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2023.04.118>.
- SUN, H.; YANG, S.; BAO, G.; LUO, K.; HU, J.; WANG, H. CFD investigation of the complex multiphase flow of biomass gasification in industrial-scale dual fluidized bed reactor.

- Chemical Engineering Journal**, v. 457, 1 fev. 2023b. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2023.141312>.
- SUTHERLAND, W. The viscosity of gases and molecular force. **The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science**, v. 36, n. 223, p. 507–531, 1893. <https://doi.org/10.1080/14786449308620508>.
- TAME, N. W.; DLUGOGORSKI, B. Z.; KENNEDY, E. M. Formation of dioxins and furans during combustion of treated wood. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 33, n. 4, p. 384–408, 2007. <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2007.01.001>.
- THOMSON, R.; KWONG, P.; AHMAD, E.; NIGAM, K. D. P. **Clean syngas from small commercial biomass gasifiers; a review of gasifier development, recent advances and performance evaluation** **International Journal of Hydrogen Energy** Elsevier Ltd, , 21 ago. 2020. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.05.160>.
- TIMSINA, R.; THAPA, R. K.; MOLDESTAD, B. M. E.; JAISWAL, R.; BHATTARAI, A.; JECMENICA, M.; EIKELAND, M. S. Experimental evaluation of wood and grass pellets in a bubbling fluidized bed gasifier. **Energy Reports**, v. 9, p. 4049–4058, 1 dez. 2023. <https://doi.org/10.1016/j.egyr.2023.03.041>.
- TSEKOS, C.; DEL GROSSO, M.; DE JONG, W. Gasification of woody biomass in a novel indirectly heated bubbling fluidized bed steam reformer. **Fuel Processing Technology**, v. 224, 15 dez. 2021. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2021.107003>.
- VALERIO FATTI; LUCA FOIS. **CFD modeling of gas-solid fluidized beds in OpenFOAM: a comparison between the Eulerian-Eulerian and Eulerian-Lagrangian methods**. [s.l.: s.n.].
- VAN WACHEM, B. G. M. **Derivation, implementation, and validation of computer simulation models for gas-solid fluidized beds**. [s.l.: s.n.].
- VARJANI, S. **Efficient removal of tar employing dolomite catalyst in gasification: Challenges and opportunities** **Science of the Total Environment** Elsevier B.V., , 25 ago. 2022. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2022.155721>.
- VERISSIMO, G. L.; LEIROZ, A. J. K.; CRUZ, M. E. Influence of the pyrolysis and heterogeneous char reactions modeling in the simulation of sugarcane bagasse gasification in a bubbling fluidized bed reactor. **Fuel**, v. 281, n. July, p. 118750, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.118750>.
- VON BERG, L.; ANCA-COUCÉ, A.; HOCHENAUER, C.; SCHARLER, R. Multi-scale modelling of a fluidized bed biomass gasifier of industrial size (1 MW) using a detailed particle model coupled to CFD: Proof of feasibility and advantages over simplified approaches. **Energy Conversion and Management**, v. 286, n. February, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2023.117070>.
- WANG, B.; GUPTA, R.; BEI, L.; WAN, Q.; SUN, L. A review on gasification of municipal solid waste (MSW): Syngas production, tar formation, mineral transformation and industrial challenges. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 48, n. 69, p. 26676–26706, 12 ago. 2023. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.03.086>.
- WANG, J.; KU, X. Numerical simulation of biomass steam gasification in an internally interconnected fluidized bed using a two-grid MP-PIC model. **Chemical Engineering Science**, v. 272, 15 maio 2023. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2023.118608>.
- WATSON, J.; ZHANG, Y.; SI, B.; CHEN, W. T.; DE SOUZA, R. Gasification of biowaste: A critical review and outlooks. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 83, n. October 2017, p. 1–17, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.10.003>.
- WEN, C. Y.; YU, Y. H. A generalized method for predicting the minimum fluidization velocity. **AIChE Journal**, v. 12, n. 3, p. 610–612, 1966. <https://doi.org/10.1002/aic.690120343>.
- WIDJAYA, E. R.; CHEN, G.; BOWTELL, L.; HILLS, C. **Gasification of non-woody biomass: A literature review** **Renewable and Sustainable Energy Reviews** Elsevier Ltd, , 1 jun. 2018. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2018.03.023>.

- WIDUCH, A. K.; PROF, S.; JORGE, P.; COELHO, M. Modeling of heat transfer in a combustion chamber and multiphase flow in a pilot-scale CFB Energy Engineering and Management. n. September, 2019.
- WINKLINGER, J. F.; NOVELLA, R.; VALENCIA, R. **Implementation of a Combustion Model based on the Flamelet Concept and its Application to turbulent reactive Sprays Doctoral Thesis.** [s.l.: s.n.].
- YAN, B.; JIA, X.; LI, J.; LI, Z.; CHE, Y.; ZHOU, Z.; ZHAO, J.; ZHOU, S.; CHEN, G. In-situ elimination of biomass gasification tar based on the understanding of tar formation process: A review. **Journal of the Energy Institute**, v. 112, p. 101477, fev. 2024. <https://doi.org/10.1016/j.joei.2023.101477>.
- YANG, M.; ZHANG, J.; ZHONG, S.; LI, T.; LØVÅS, T.; FATEHI, H.; BAI, X. S. CFD modeling of biomass combustion and gasification in fluidized bed reactors using a distribution kernel method. **Combustion and Flame**, v. 236, p. 111744, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2021.111744>.
- YANG, M.; MOUSAVI, S. M.; FATEHI, H.; BAI, X. S. Numerical simulation of biomass gasification in fluidized bed gasifiers. **Fuel**, v. 337, 1 abr. 2023. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.127104>.
- YANG, N.; WANG, W.; GE, W.; LI, J. CFD simulation of concurrent-up gas-solid flow in circulating fluidized beds with structure-dependent drag coefficient. **Chemical Engineering Journal**, v. 96, n. 1–3, p. 71–80, 15 dez. 2003. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2003.08.006>.
- YANG, S.; WANG, S.; WANG, H. Particle-scale evaluation of the pyrolysis process of biomass material in a reactive gas-solid spouted reactor. **Chemical Engineering Journal**, v. 421, n. P2, p. 127787, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.127787>.
- YANG, W.-C. **HANDBOOK of FLUIDIZATION and FLUID-PARTICLE SYSTEMS.** New York: Marcel Dekker, Inc., 2003.
- YU, J.; WANG, S.; LUO, K.; LI, D.; FAN, J. Study of biomass gasification in an industrial-scale dual circulating fluidized bed (DCFB) using the Eulerian-Lagrangian method. **Particuology**, v. 83, p. 156–168, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.partic.2023.02.018>.
- ZHANG, J.; WANG, Y.; ZHANG, Y.; WU, Q.; XIN, L.; ZHOU, Y.; YIN, K.; WANG, Y.; LI, X.; CUI, P. A novel power, DME, and ammonia polygeneration system using Aspen plus based on the integration of biomass gasification and syngas chemical looping. **Energy Conversion and Management**, v. 299, 1 jan. 2024. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2023.117808>.
- ZHAO, Y.; YAO, J.; CHEN, G.; LIU, J.; CHENG, Z.; WANG, L.; YI, W.; XU, S. Energy, efficiency, and environmental analysis of hydrogen generation via plasma co-gasification of biomass and plastics based on parameter simulation using Aspen plus. **Energy Conversion and Management**, v. 295, 1 nov. 2023. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2023.117623>.
- ZHONG, W.; YU, A.; ZHOU, G.; XIE, J.; ZHANG, H. CFD simulation of dense particulate reaction system: Approaches, recent advances and applications. **Chemical Engineering Science**, v. 140, p. 16–43, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2015.09.035>.

APÊNDICE I

6.1. Estudo de Caso: Definições e Parâmetros para simulações de Devolatilização

O modelo computacional apresentado a seguir, engloba apenas a reação química de devolatilização da biomassa, que consiste na conversão da biomassa em carvão (*char*/carbono) e nos gases produtos. O processo de devolatilização da pirólise foi implementado em um sistema trifásico, composto por areia e partículas de biomassa em uma fase contínua gasosa. Os componentes da fase gasosa considerados foram H_2 , CO , CO_2 , CH_4 , H_2O , O_2 e N_2 . As partículas de biomassa são compostas por carvão e a matéria quimicamente ativa da biomassa (*biomassa consumível*).

Nesta etapa, a biomassa de madeira de pinho foi utilizada, devido à homogeneidade de sua composição e a disponibilidade de dados na literatura científica. As taxas de devolatilização da mesma, em base seca e sem cinzas, são: 0,106 kg/kg de H_2 , 0,313 kg/kg de CO , 0,146 kg/kg de CO_2 , 0,035 kg/kg de CH_4 , 0,200 kg/kg de H_2O e 0,200 kg/kg de C (QI et al., 2019).

Devido a geometria simples do reator do trabalho de (QI et al., 2019), apresentada na Fig. 6.1, ele foi reproduzido com a finalidade de verificação da modelagem do presente trabalho. A geometria com 1,5 m de altura e 0,15 m de largura (Fig. 6.1a) possui um domínio pseudo-2D em que o software considera uma espessura pequena para evitar problemas numéricos e foi dividida em células quadradas de 0,0075 m de aresta, totalizando 4.000 células hexaédricas para discretização em Volume Finitos (Fig. 6.1b).

O reator foi inicialmente preenchido até um terço de sua altura com partículas de areia e biomassa, no meio contínuo de ar atmosférico (Fig. 6.1c,d,e), com 0,10628 kg de partículas (100% *biomassa consumível*), 1,50750 kg de areia e 0,00195 kg de ar (22% de O_2 e 78% de N_2). A densidade da biomassa de 470 kg/m^3 , diâmetro da partícula de biomassa de 5×10^{-3} , densidade da areia de 2.600 kg/m^3 , diâmetro da areia $0,25 \times 10^{-3}$, pressão atmosférica (101.325 Pa) de saída do reator, temperatura de operação de 670 K, paredes termicamente isoladas e velocidade intersticial de insuflamento de ar pela parte inferior de 0,05 m/s.

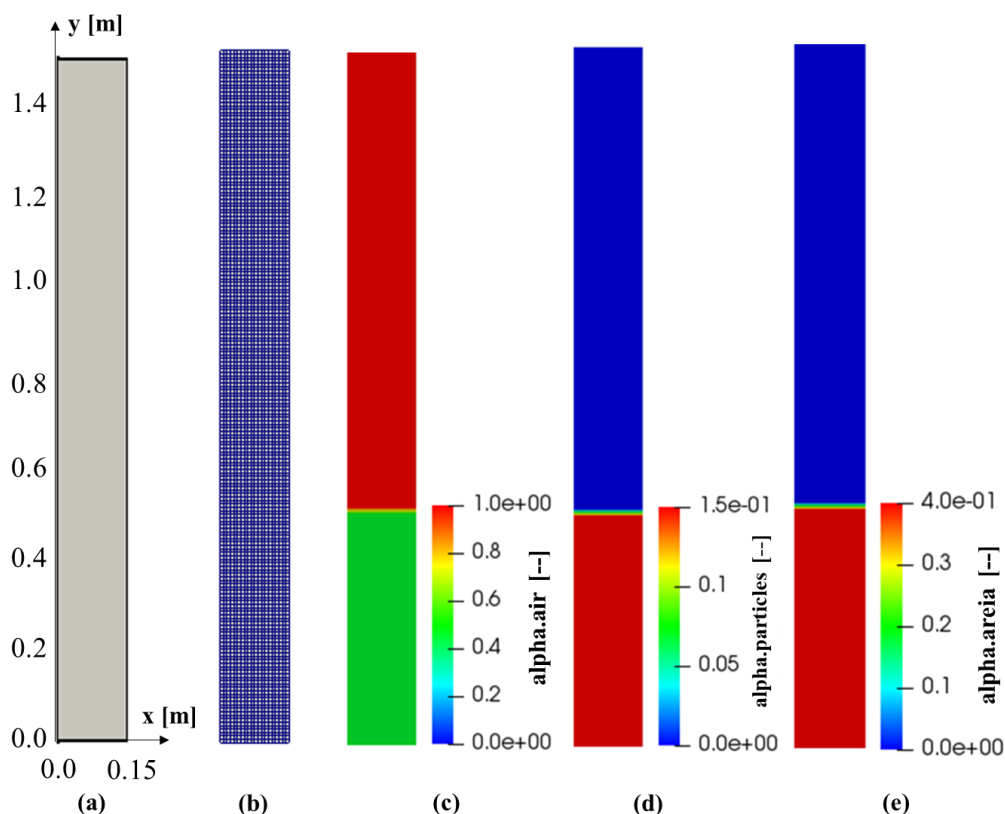


Figura 6.1. Representação da (a) geometria, (b) malha, (c) fração volumétrica de ar, (d) fração volumétrica de partículas e (e) fração volumétrica de areia inicialmente definidas para as simulações

O passo de tempo utilizado de $0,25 \times 10^{-3}$ foi implementado como um parâmetro constante e o tempo físico total de simulação adotado foi de 300 s. De acordo com simulações prévias, o sistema fluidodinâmico atinge regime permanente de escoamento aproximadamente aos 10 s, assim, o tempo total de simulação foi escolhido com intuito apenas de quantificar o balanço de massa das espécies reagentes e produtos. A Tab. 6.1 contém os principais parâmetros utilizados nessas simulações.

Tabela 6.1. Condições iniciais e parâmetros da simulação do processo de devolatilização

Parâmetro	Valor
Vazão mássica de biomassa, kg h^{-1}	N/A
Temperatura da biomassa, K	670
Diâmetro da partícula de biomassa ⁽¹⁾ , m	$1,5 \times 10^{-3}$
Quantidade inicial de biomassa, kg	0,10628
Massa específica da biomassa ⁽¹⁾ , kg m^{-3}	470
Massa específica do <i>char</i> , kg m^{-3}	180
Termo fonte de massa, kg s^{-1}	N/A
Termo fonte de energia, $\text{kg.m}^2 \text{s}^{-3}$	N/A
Massa específica da areia ⁽¹⁾ , kg m^{-3}	2600
Diâmetro da areia ⁽¹⁾ , m	5×10^{-4}
Temperatura do ar insuflado, K	670

Temperatura inicial do reator, K	670
Temperatura de Operação⁽¹⁾, K	670
Condição de contorno das paredes	Isoladas
Velocidade intersticial de entrada do ar, m s⁻¹	0,05
Pressão de saída, kPa	Atmosférica
Pressão atmosférica, kPa	101,325
Aresta das células da malha, m	0,0075

N/A – não se aplica, ⁽¹⁾Adotada de acordo com (Qi et al., 2019)

APÊNDICE II

6.2. Condições de contorno configuradas para o modelo definitivo do presente trabalho implementadas no OpenFOAM

Tabela 6.2 – Relação das condições de contorno definidas para cada superfície de controle para cada uma das variáveis do modelo

Variável	Inlet	Outlet	Walls
<i>alpha.air</i>	<i>Zero gradient</i>	<i>Zero gradient</i>	<i>Zero gradient</i>
<i>alpha.particles</i>	<i>Zero gradient</i>	<i>Zero gradient</i>	<i>Zero gradient</i>
<i>alpha.areia</i>	<i>Zero gradient</i>	<i>Zero gradient</i>	<i>Zero gradient</i>
<i>alphat.air</i>	<i>Calculated</i>	<i>Calculated</i>	<i>Alphat Wall Function</i>
<i>alphat.areia</i>	<i>Calculated</i>	<i>Calculated</i>	<i>Alphat Wall Function</i>
<i>alphat.particles</i>	<i>Calculated</i>	<i>Calculated</i>	<i>Calculated</i>
<i>epsilon.air</i>	<i>Fixed value</i>	<i>Inlet Outlet</i>	<i>Epsilon Wall Function</i>
<i>k.air</i>	<i>Fixed value</i>	<i>Inlet Outlet</i>	<i>kqR Wall Function</i>
<i>nut.air</i>	<i>Calculated</i>	<i>Calculated</i>	<i>Nutk Wall Function</i>
<i>nut.areia</i>	<i>Calculated</i>	<i>Calculated</i>	<i>Nutk Wall Function</i>
<i>nut.particles</i>	<i>Calculated</i>	<i>Calculated</i>	<i>Calculated</i>
<i>p</i>	<i>Calculated</i>	<i>Calculated</i>	<i>Calculated</i>
<i>p_rgh</i>	<i>Fixed flux pressure</i>	<i>Pressure</i>	<i>Fixed Flux Pressure</i>
<i>T.air</i>	<i>Fixed value</i>	<i>Inlet Outlet</i>	<i>Zero gradient</i>
<i>T.areia</i>	<i>Zero gradient</i>	<i>Inlet Outlet</i>	<i>Zero gradient</i>
<i>T.particles</i>	<i>Zero gradient</i>	<i>Inlet Outlet</i>	<i>Zero gradient</i>
<i>Theta.areia</i>	<i>Fixed value</i>	<i>Zero gradient</i>	<i>Zero gradient</i>
<i>Theta.particles</i>	<i>Fixed value</i>	<i>Zero gradient</i>	<i>Zero gradient</i>
<i>U.air</i>	<i>Interstitial inlet velocity</i>	<i>Pressure Inlet Outlet Velocity</i>	<i>No slip</i>
<i>U.areia</i>	<i>Zero gradient</i>	<i>Fixed value</i>	<i>Zero gradient</i>
<i>U.particles</i>	<i>Zero gradient</i>	<i>Fixed value</i>	<i>Zero gradient</i>

* Para informações detalhadas, todas as funções de condições de contorno do OpenFOAM podem ser consultadas no Guia do Usuário do OpenFOAM.

APÊNDICE III

IMPLEMENTAÇÕES NO SOFTWARE OPENFOAM

6.3. Árvore de arquivos de sistema do software

O solver *multiphaseEulerFoam* foi adaptado no presente trabalho para compor o novo solver denominado ***carbogasEulerFoam***, no mesmo diretório do sistema, conforme a Fig. 6.2. As adaptações realizadas consistem na inclusão de arquivos (formato .C e .H) de código para cálculos e aquisição de dados.

Arquivos incluídos no diretório *carbogasEulerFoam* e compilados junto ao solver:

- *carbogasEulerFoam.C*: principal script do solver, contendo as principais equações e inclusão das demais funções do algoritmo.
- *reactionsRates.H*: calcula as taxas de reações conforme equações do Capítulo III.
- *printInitialMass.H*: calcula e escreve na tela durante as simulações a massa total e composições iniciais de cada uma das fases e espécies envolvidas no sistema, além de inicializar variáveis.
- *printInstMass.H*: escreve no prompt de comando as massas instantâneas de espécies e fases do sistema, além da indexação em variáveis.
- Arquivos para aquisição e escritura de dados referente às reações químicas: *devolatilization.H*, *boudouard.H*, *reforming.H*, *methanation.H*, *waterGasShift.H* e *methaneSteamReforming.H*.

Arquivos alterados no diretório do solver e compilados:

- *createFields.H*: inicializa campos vetoriais, variáveis e leituras iniciais de parâmetros.
- *YEqns.H*: código que contém a equação do balanço de massa/espécies. Foram incluídos os termos fonte de massa/espécies nessa equação.

Arquivos incluídos e/ou alterados no diretório do 'caso' de simulação:

- *heterogeneousChemicalProperties*: arquivo contendo as informações para as espécies envolvidas em reações químicas, constantes químicas e coeficientes estequiométricos de reações.
- *fvSchemes*: inclusão de esquemas de solução numérica necessários referentes às fases presentes no sistema.

- *blockMeshDict*: arquivo com os códigos de programação da criação da geometria/malha do sistema, tipos de células utilizadas e grau de refinamento requerido.
- *controlDict*: arquivo de controle geral das simulações, definições numéricas de passos de tempo, tempo físico, escritura de dados e aquisição de informações selecionadas por meio de funções.
- *singleGraph*: arquivo para definição de linha geométrica para aquisição de dados.
- *topoSetDict*: arquivo para definição de regiões de interesse na malha numérica.
- *setFields*: definição de condições iniciais referente à fração mássica de fases envolvidas. Nesse arquivo é configurada a quantidade de areia, biomassa e gás inicialmente presente no reator.
- *decomposeParDict*: arquivo para definição da paralelização da solução numérica em função do número de processadores e metodologia computacional aplicada.
- *fvSolutions*: contém um conjunto de subdicionários específicos do solver. No entanto, existe um pequeno conjunto de subdicionários padrão que cobrem a maioria daqueles usados pelos solvers padrão. Esses subdicionários incluem solvers, fatores de relaxação, PISO e SIMPLE.

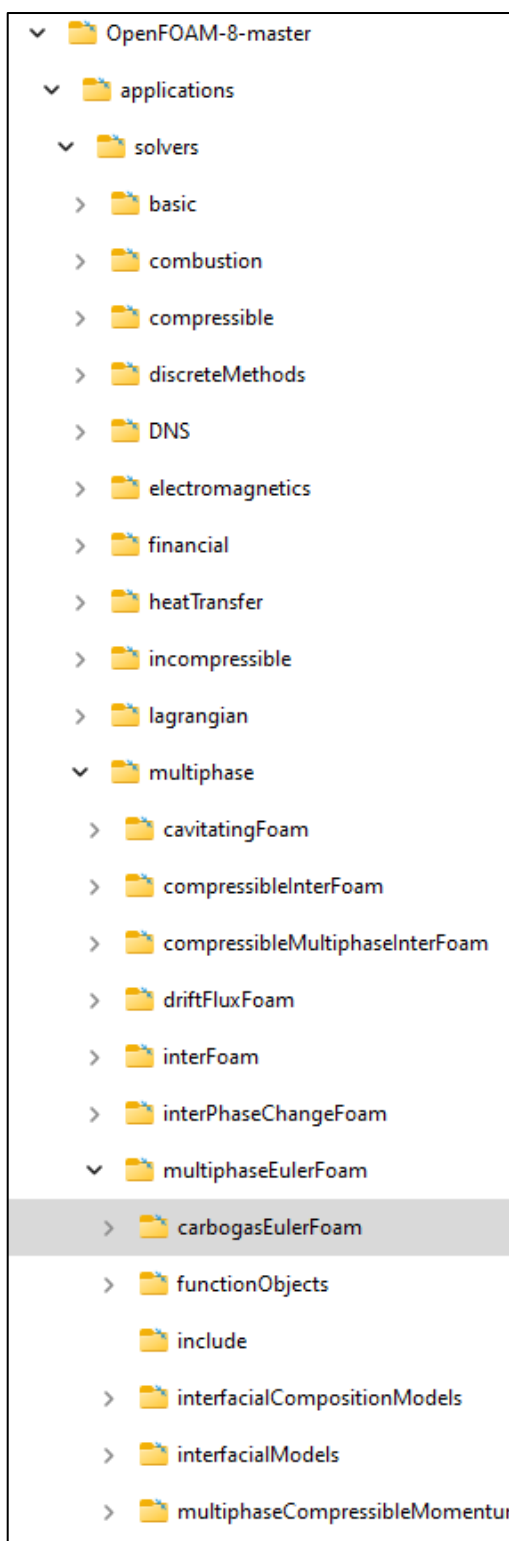


Figura 6.2 – Arquivos de sistema na raiz do software instalado e localização do solver *carbogasEulerFoam* adaptado no presente trabalho do solver original *multiphaseEulerFoam*

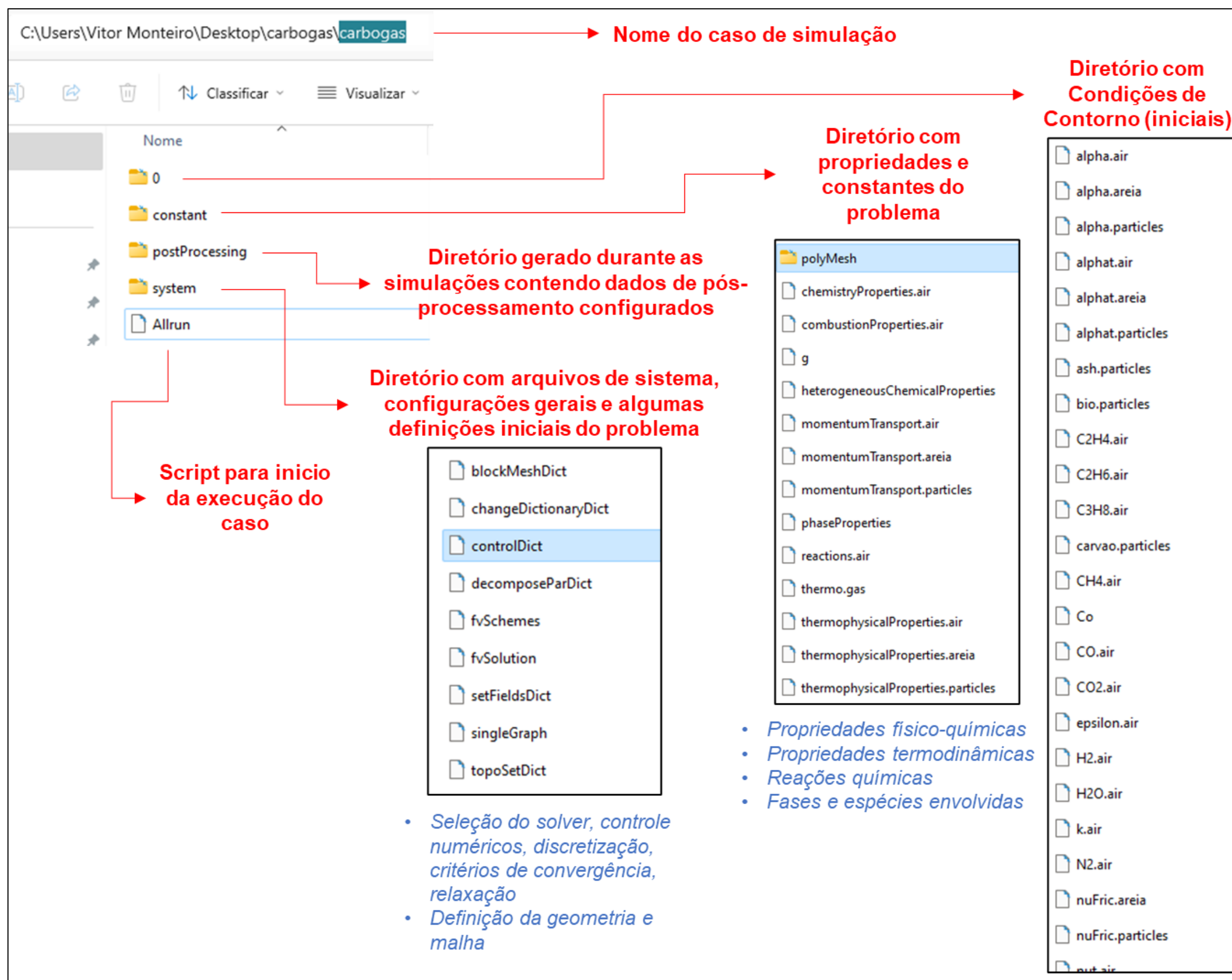


Figura 6.3 – Diretório típico de um 'caso' de simulação do OpenFoam

6.4.carbogasEulerFoam.C

```

/*-----*\
=====
\\      /   F i e l d           |   OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
\\      /   O peration          |   Website:  https://openfoam.org
\\      /   A nd                 |   Copyright (C) 2011-2020 OpenFOAM Foundation
\\\/      M anipulation         |
-----*\

License
    This file is part of OpenFOAM.

    OpenFOAM is free software: you can redistribute it and/or modify it
    under the terms of the GNU General Public License as published by
    the Free Software Foundation, either version 3 of the License, or
    (at your option) any later version.

    OpenFOAM is distributed in the hope that it will be useful, but WITHOUT
    ANY WARRANTY; without even the implied warranty of MERCHANTABILITY or
    FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. See the GNU General Public License
    for more details.

    You should have received a copy of the GNU General Public License
    along with OpenFOAM. If not, see <http://www.gnu.org/licenses/>.

Application
    reactingMultiphaseEulerFoam

Description
    Solver for a system of any number of compressible fluid phases with a
    common pressure, but otherwise separate properties. The type of phase model
    is run time selectable and can optionally represent multiple species and
    in-phase reactions. The phase system is also run time selectable and can
    optionally represent different types of momentum, heat and mass transfer.

\*-----*/

#include "fvCFD.H"
#include "phaseSystem.H"
#include "phaseCompressibleMomentumTransportModel.H"
#include "pimpleControl.H"
#include "localEulerDdtScheme.H"
#include "fvcSmooth.H"

// * * * * *

int main(int argc, char *argv[])
{
    #include "postProcess.H"

    #include "setRootCaseLists.H"
    #include "createTime.H"
    #include "createMesh.H"
    #include "createControl.H"
    #include "createTimeControls.H"
    #include "createFields.H"
    #include "createFieldRefs.H"

    if (!LTS)

```

```

{
    #include "CourantNo.H"
    #include "setInitialDeltaT.H"
}

Switch faceMomentum
(
    pimple.dict().lookupOrDefault<Switch>("faceMomentum", false)
);
Switch partialElimination
(
    pimple.dict().lookupOrDefault<Switch>("partialElimination", false)
);

#include "createRDeltaTf.H"

// * * * * *

//CRIAÇÃO DOS ARQUIVOS NA PASTA POSTPROCESSING COM OS DADOS CALCULADOS
    autoPtr<OFstream> outputFilePtr1;
    fileName outputDir1 = "./postProcessing/alphaYrho/" +
mesh.time().timeName();
    //fileName outputDir1 = "./postProcessing/totalMass/" +
args.optionFound("dict");
    mkdir(outputDir1);
    outputFilePtr1.reset(new OFstream(outputDir1/"alphaYrho.dat"));

    autoPtr<OFstream> outputFilePtr3;
    fileName outputDir3 = "./postProcessing/balance/" +
mesh.time().timeName();
    mkdir(outputDir3);
    outputFilePtr3.reset(new OFstream(outputDir3/"balance.dat"));

    autoPtr<OFstream> outputFilePtrN;
    fileName outputDirN = "./postProcessing/devolatilization/" +
mesh.time().timeName();
    mkdir(outputDirN);
    outputFilePtrN.reset(new
OFstream(outputDirN/"devolatilization.dat"));

    autoPtr<OFstream> outputFilePtrN1;
    fileName outputDirN1 = "./postProcessing/boudouard/" +
mesh.time().timeName();
    mkdir(outputDirN1);
    outputFilePtrN1.reset(new OFstream(outputDirN1/"boudouard.dat"));

    autoPtr<OFstream> outputFilePtrN2;
    fileName outputDirN2 = "./postProcessing/reforming/" +
mesh.time().timeName();
    mkdir(outputDirN2);
    outputFilePtrN2.reset(new OFstream(outputDirN2/"reforming.dat"));

    autoPtr<OFstream> outputFilePtrN3;
    fileName outputDirN3 = "./postProcessing/methanation/" +
mesh.time().timeName();
    mkdir(outputDirN3);
    outputFilePtrN3.reset(new
OFstream(outputDirN3/"methanation.dat"));

    autoPtr<OFstream> outputFilePtrT1;

```

```

        fileName outputDirT1 = "./postProcessing/waterGasShift/" +
mesh.time().timeName();
        mkdir(outputDirT1);
        outputFilePtrT1.reset(new
OFstream(outputDirT1/"waterGasShift.dat"));

        autoPtr<OFstream> outputFilePtrT2;
        fileName outputDirT2 = "./postProcessing/methaneSteamReforming/" +
mesh.time().timeName();
        mkdir(outputDirT2);
        outputFilePtrT2.reset(new
OFstream(outputDirT2/"methaneSteamReforming.dat"));

        outputFilePtr1() <<    "# Time";

        forAll(fluid.multiComponentPhases(), multiComponentPhasei) // Loop
para rodar todas as fases
        {
            phaseModel& phase =
fluid.multiComponentPhases()[multiComponentPhasei]; // Identificação da phase
            UPtrList<volScalarField>& Y = phase.YRef(); // Access the active
species mass fractions
            forAll(Y, i) // Loop para rodar todas as espécies da fase
            {
                outputFilePtr1() <<    " " << Y[i].name();
            } // fim for espécies
        } //fim for phases
        outputFilePtr1() <<    ""    << endl;

        outputFilePtrN() <<    "# Time idmBIO(inst)          dmH2O dmCO  dmCO2
dmCH4 dmH2  dmC  erro_relativo";
        //outputFilePtrN1() <<    "# Time          REAGENTES  PRODUTOS    mCO
phiCO miC  mC  phiInCO2  phiOutCO2";
        outputFilePtrN1() <<    "# Time idmC(inst)  dmCO2 dmCO  erro_relativo";
        //outputFilePtrN2() <<    "# Time          REAGENTES  PRODUTOS    mCO  mH2
phiCO phiH2 miC  mC  miH2O mH2O  phiInH2O  phiOutH2O";
        outputFilePtrN2() <<    "# Time idmC(inst)  dmH2O dmCO  dmH2
erro_relativo";
        //outputFilePtrN3() <<    "# Time          REAGENTES  PRODUTOS    mCH4
phiCH4 miC  mC  phiInH2  phiOutH2";
        outputFilePtrN3() <<    "# Time idmC(inst)  dmH2  dmCH4 erro_relativo";
        outputFilePtrT1() <<    "# Time dmCO  dmH2O dmCO2 dmH2  erro_relativo";
        outputFilePtrT2() <<    "# Time dmCH4 dmH2O dmCO  dmH2  erro_relativo";

        outputFilePtrN() <<    ""    << endl;
        outputFilePtrN1() <<    ""    << endl;
        outputFilePtrN2() <<    ""    << endl;
        outputFilePtrN3() <<    ""    << endl;
        outputFilePtrT1() <<    ""    << endl;
        outputFilePtrT2() <<    ""    << endl;

const scalarField& v = mesh.V();

//const scalarField& inletFace = mesh.boundaryMesh()[0].name(); // [0] inlet
[1] outlet // const polyPatch& pp = mesh.boundaryMesh()[patchi];
//const scalarField& outletFace = mesh.boundaryMesh()[1]; //
mesh.boundaryMesh()[0].name()

```

```

//const word& name_outletFace = mesh.boundaryMesh()[1].name(); // [0] inlet [1]
outlet
//const polyPatch& outletFace = mesh.boundaryMesh()[1];
//mesh.boundaryMesh()[1]; //
//const fvPatch& outletFace = mesh.boundary()[1]; // boundaryMesh[patchI];
//Info << "      " << outletFace.name() << endl;

const label inletPatchID = mesh.boundaryMesh().findPatchID("inlet");
const label outletPatchID = mesh.boundaryMesh().findPatchID("outlet");
//const scalar areaInlet = gSum(mesh.magSf().boundaryField()[inletPatchID]);
//const scalar areaOutlet = gSum(mesh.magSf().boundaryField()[outletPatchID]);
//Info<< "Area magnitude of patch " << "inlet " << '[' << inletPatchID << ']'
<< " = " << areaInlet << endl;
//Info<< "Area magnitude of patch " << "outlet " << '[' << outletPatchID << ']'
<< " = " << areaOutlet << endl;

scalar sumPhiInBIO = 0;
scalar sumPhiOutBIO = 0;
scalar sumPhiBIO = 0;

scalar sumPhiInC = 0;
scalar sumPhiOutC = 0;
scalar sumPhiC = 0;

scalar sumPhiInCO2 = 0;
scalar sumPhiOutCO2 = 0;
scalar sumPhiCO2 = 0;

scalar sumPhiInCO = 0;
scalar sumPhiOutCO = 0;
scalar sumPhiCO = 0;

scalar sumPhiInH2O = 0;
scalar sumPhiOutH2O = 0;
scalar sumPhiH2 = 0;

scalar sumPhiInH2 = 0;
scalar sumPhiOutH2 = 0;
scalar sumPhiCH4 = 0;

    Info<< "\nStarting time loop\n" << endl;

    #include "printInitialMass.H" // MASSA INICIAL (print na tela +
contabilização WATERSHIFT)

    while (pimple.run(runTime))
    {
//#include "printInstMass.H"

        #include "readTimeControls.H"

        int nEnergyCorrectors
        (
            pimple.dict().lookupOrDefault<int>("nEnergyCorrectors", 1)
        );

        if (LTS)
        {

```

```

        #include "setRDeltaT.H"
        if (faceMomentum)
        {
            #include "setRDeltaTf.H"
        }
    }
else
{
    #include "CourantNo.H"
    #include "setDeltaT.H"
}

// #include "printInstMass.H"

runTime++;
Info<< "Time = " << runTime.timeName() << nl << endl;

// #include "printInstMass.H"

// --- Pressure-velocity PIMPLE corrector loop
while (pimple.loop())
{

// #include "printInstMass.H" // nessa posição os dados mostrados na ultima
// interação batem com controlDict

#include "reactionsRates.H"

    /*    phaseModel& phase1 = fluid.multiComponentPhases()[0]; //
particles
    UPtrList<volScalarField>& Y1 = phase1.YActiveRef(); // alpha particles
        phaseModel& phase2 = fluid.multiComponentPhases()[1]; // air
    UPtrList<volScalarField>& Y2 = phase2.YActiveRef(); // alpha air

    A_p = (6.0/d_0)*phase1;

    T_p = phase1.thermo().T();
    T_air = phase2.thermo().T();
    T_mean = 0.5*T_p+0.5*T_air;

    tx = A*Foam::exp(-E/(R_u*T_p));
    r_diff = (C_i/d_0)*Foam::pow(T_mean,0.75);
    r_k1 = A1*T_p*Foam::exp(-E1/(R_u*T_p));
    r_k2 = A2*T_p*Foam::exp(-E2/(R_u*T_p));

    IOdictionary heterogeneousChemicalProperties
    (
        IOobject
        (
            "heterogeneousChemicalProperties",
            runTime.constant(),
            mesh,
            IOobject::MUST_READ_IF_MODIFIED,
            IOobject::NO_WRITE
        )
    ); */

    // CARBONO
    // phaseModel& phase1 = fluid.multiComponentPhases()[0]; //
multiComponentPhases - Return the models for phases that have multiple species

```

```

//UPtrList<volScalarField>& Y1 = phase1.YActiveRef(); // YActiveRef -
Access the active species mass fractions
//const dictionary& subDict = heterogeneousChemicalProperties.subDict("C");
// Leitura do Carbono
//dimensionedScalar MMC_("MMC", dimensionSet(1,0,0,0,-1,0,0), scalar(0.0));
//MMC_ = subDict.lookup("MM"); // Indexação da massa molar do Carbono
//dimensionedScalar n_("n", dimensionSet(0,0,0,0,0,0,0), scalar(0.0));

// if (Y1[1].value() > scalar(0.05))
// {
//     tx1 = Y1[1]*A_p*p*Y2[0]*(r_diff*r_k1)/(r_diff+r_k1);
//     tx2 = Y1[1]*A_p*p*Y2[1]*(r_diff*r_k2)/(r_diff+r_k2);*/
// }
else
{*/
// tx1 = (0.0/4.0)/d_0*p*Y2[0]*(r_diff*r_k1)/(r_diff+r_k1);
// tx2 = (0.0/4.0)/d_0*p*Y2[1]*(r_diff*r_k2)/(r_diff+r_k2);*/
// }

/* forAll(tx1, i)
{
    if (Y1[0][i] < 0.3 and Y1[1][i] > 0.0025 and phase1[i] > 0.0025)
    {
        tx1[i] =
A_p[i]*p[i]*Y2[0][i]*(r_diff[i]*r_k1[i])/(r_diff[i]+r_k1[i]);
        tx2[i] =
A_p[i]*p[i]*Y2[1][i]*(r_diff[i]*r_k2[i])/(r_diff[i]+r_k2[i]);
    }
    else
    {
        tx1[i] =
0.0*A_p[i]*p[i]*Y2[0][i]*(r_diff[i]*r_k1[i])/(r_diff[i]+r_k1[i]);
        tx2[i] =
0.0*A_p[i]*p[i]*Y2[1][i]*(r_diff[i]*r_k2[i])/(r_diff[i]+r_k2[i]);
    }
}*/

/*tx1 = phase1*Y1[1]*A_p*p*Y2[0]*(r_diff*r_k1)/(r_diff+r_k1);
tx2 = phase1*Y1[1]*A_p*p*Y2[1]*(r_diff*r_k2)/(r_diff+r_k2);*/

tx.correctBoundaryConditions();
tx1.correctBoundaryConditions();
tx2.correctBoundaryConditions();
tx3.correctBoundaryConditions();

fluid.solve(rAUs, rAUfs);
fluid.correct(); // atualiza os Y e recalcula as propriedades //
Correct the phase properties.

/*
// calculo das taxas
dimensionedScalar rho_biomassa_("rho_biomassa", dimensionSet(1,-
3,0,0,0,0,0), scalar(470.0));
rhoY_bio = phase0*rho_biomassa_*Y1[0];
rhoY_bio_tx = tx*rhoY_bio;
*/

fluid.correctContinuityError();

```

```

#include "YEqns.H"

    if (faceMomentum)
    {
        #include "pUf/UEqns.H"
        #include "EEqns.H"
        #include "pUf/pEqn.H"
    }
    else
    {
        #include "pU/UEqns.H"
        #include "EEqns.H"
        #include "pU/pEqn.H"
    }

    fluid.correctKinematics();

    if (pimple.turbCorr())
    {
        fluid.correctTurbulence();
    }

} // fim_while_pimple

#include "printInstMass.H"

runTime.write();

Info<< "ExecutionTime = "
    << runTime.elapsedCpuTime()
    << " s\n\n" << endl;

//

int ii = 0;
vector alphaYrho;
outputFilePtr1() << runTime.timeName();
forAll(fluid.multiComponentPhases(), multiComponentPhasei) // Loop para rodar
todas as fases
{
    phaseModel& phase = fluid.multiComponentPhases()[multiComponentPhasei];
// Identificação da phase
    UPtrList<volScalarField>& Y = phase.YRef(); // Access the active species
mass fractions
    //Info << "PHASE: " << phase.name() << " total mass: " <<
gSum(phase*phase.rho()*v) << endl;
    const volScalarField& rho = phase.rho();

    forAll(Y, i) // Loop para rodar todas as espécies da fase
    {
        const volScalarField& alpha = Y[i];
        alphaYrho[ii] = gSum(alpha*phase*rho*v); // massa de cada
espécie
        outputFilePtr1() << "    " << alphaYrho[ii];
    } // fim for espécies
}

```

```

//

//#include "printInstMass.H" // ta dando uma diferença razoável com controlDict

outputFilePtr1() << runTime.timeName();
outputFilePtr3() << runTime.timeName();

//outputFilePtrN1() << runTime.timeName();
//outputFilePtrN2() << runTime.timeName();
//outputFilePtrN3() << runTime.timeName();

// CÁLCULO DA MASSA INSTANTÂNEA DAS ESPÉCIES
const scalar mBIO = gSum(Yp[0]*phase0*rho_s*v); // massa da espécie bio
instantânea
const scalar mC = gSum(Yp[1]*phase0*rho_s*v); // massa da espécie carvão
instantânea
const scalar mH2O = gSum(Ya[0]*phase1*rho_a*v); // massa da espécie H2O
instantânea
const scalar mCO2 = gSum(Ya[1]*phase1*rho_a*v); // massa da espécie CO2
instantânea
const scalar mCO = gSum(Ya[2]*phase1*rho_a*v); // massa da espécie CO
instantânea
const scalar mH2 = gSum(Ya[3]*phase1*rho_a*v); // massa da espécie H2
instantânea
const scalar mCH4 = gSum(Ya[6]*phase1*rho_a*v); // massa da espécie CH4
instantânea

// CÁLCULO DE FLUXO DE ESPÉCIES
const scalarField& inletPatchPhi = phi.boundaryField()[inletPatchID];
const scalarField& outletPatchPhi = phi.boundaryField()[outletPatchID];
phaseModel& phase1 = fluid.multiComponentPhases()[1]; // Air
const volScalarField& rho = phase1.rho();
const scalarField& rho_xIn = rho.boundaryField()[inletPatchID];
const scalarField& rho_xOut = rho.boundaryField()[outletPatchID];
scalar phiInCO2 =
gSum(rho_xIn*Ya[1].boundaryField()[inletPatchID]*inletPatchPhi); // igual a
(phasexy*rhoi*Yip*outletPatchPhi)
scalar phiOutCO2 =
gSum(rho_xOut*Ya[1].boundaryField()[outletPatchID]*outletPatchPhi); // bateu
com controlDict inletMassFluxComposition
scalar phiCO =
gSum(rho_xOut*Ya[2].boundaryField()[outletPatchID]*outletPatchPhi);
const scalarField& phase1In = phase1.boundaryField()[inletPatchID];
const scalarField& phase1Out = phase1.boundaryField()[outletPatchID];
scalar phiInH2 =
gSum(rho_xIn*Ya[3].boundaryField()[inletPatchID]*inletPatchPhi); // igual a
(phasexy*rhoi*Yip*outletPatchPhi)
scalar phiOutH2 =
gSum(rho_xOut*Ya[3].boundaryField()[outletPatchID]*outletPatchPhi); // bateu
com controlDict inletMassFluxComposition
scalar phiInH2O =
gSum(phase1In*rho_xIn*Ya[0].boundaryField()[inletPatchID]*inletPatchPhi); //
igual a (phasexy*rhoi*Yip*outletPatchPhi)
scalar phiOutH2O =
gSum(phase1Out*rho_xOut*Ya[0].boundaryField()[outletPatchID]*outletPatchPhi);
scalar phiH2 =
gSum(phase1Out*rho_xOut*Ya[3].boundaryField()[outletPatchID]*outletPatchPhi);
scalar phiCH4 =
gSum(rho_xOut*Ya[6].boundaryField()[outletPatchID]*outletPatchPhi);

// INTERNAMENTE NO REATOR

```

```

scalar idmBIO = (mBIO - miBIO); // internamente
scalar idmC = (mC - miC); // internamente
scalar idmCO2 = (mCO2 - miCO2); // internamente no reator -> deve ser negativo:
havia mais CO2 no início que no fim - ok
scalar idmH2O = (mH2O - miH2O); // internamente no reator -> deve ser negativo:
havia mais H2O no início que no fim
scalar idmCO = (mCO - miCO); // internamente no reator
scalar idmH2 = (mH2 - miH2);
scalar idmCH4 = (mCH4 - miCH4); // internamente no reator

// SOMATÓRIOS FLUXOS
sumPhiInCO2 = sumPhiInCO2 + phiInCO2;
sumPhiOutCO2 = sumPhiOutCO2 + phiOutCO2;
scalar sumPhiCO2 = sumPhiInCO2 + sumPhiOutCO2; // diferença de tudo que entrou
e o que saiu (Deve ser negativo) - ok
sumPhiCO2 = 0; //teste
scalar dmCO2 = idmCO2 + sumPhiCO2;

sumPhiCO = sumPhiCO + phiCO;
sumPhiCO = 0; //teste
scalar dmCO = (idmCO + sumPhiCO);

sumPhiInH2O = sumPhiInH2O + phiInH2O;
sumPhiOutH2O = sumPhiOutH2O + phiOutH2O;
scalar sumPhiH2O = sumPhiInH2O + sumPhiOutH2O; // soma de tudo que entrou e o
que saiu (Deve ser negativo)
sumPhiH2O = 0; //teste
scalar dmH2O = idmH2O + sumPhiH2O;

sumPhiH2 = 0; //teste
//sumPhiH2 = sumPhiH2 + phiH2;
scalar dmH2 = (idmH2 + sumPhiH2);
sumPhiInH2 = sumPhiInH2 + phiInH2;
sumPhiOutH2 = sumPhiOutH2 + phiOutH2;

sumPhiCH4 = 0; //teste
//sumPhiCH4 = sumPhiCH4 + phiCH4;
scalar dmCH4 = (idmCH4 + sumPhiCH4);

///// BALANÇO REAÇÕES HETEROGÊNEAS
#include "devolatilization.H" // print e write da reação heterogênea (n)
DEVOLATILIZATION
#include "boudouard.H" // print e write da reação heterogênea (n1) BOUDOUARD
#include "reforming.H" // print e write da reação heterogênea (n2) REFORMING OF
CHAR
#include "methanation.H" // print e write da reação heterogênea (n3)
METHANATION

///// BALANÇO REAÇÕES HOMOGÊNEAS
#include "waterGasShift.H" // balanço da reação homogênea (t1) WATER-GAS SHIFT
#include "methaneSteamReforming.H" // balanço da reação homogênea (t2) METHANE-
STEAM REFORMING

// #include "printInstMass.H"

```

```

outputFilePtr1() << "" << endl; // pasta alphaYrho
outputFilePtr3() << "" << endl; // pasta balance

//outputFilePtrN1() << "" << endl; // pasta boudouard
//outputFilePtrN2() << "" << endl; // pasta reforming
//outputFilePtrN3() << "" << endl; // pasta methanation

// RELAÇÃO CHAR/BIO
/*phaseModel& phase1 = fluid.multiComponentPhases()[0]; // particles
UPtrList<volScalarField>& Y1 = phase1.YActiveRef(); // alpha particles
dimensionedScalar rho_biomassa_("rho_biomassa", dimensionSet(1,-3,0,0,0,0,0),
scalar(470.0));
dimensionedScalar rho_char_("rho_char", dimensionSet(1,-3,0,0,0,0,0),
scalar(180.0));
const volScalarField rho_bio = gSum(phase1*rho_biomassa_*Y1[0]*v);
const volScalarField rho_char = gSum(phase1*rho_char_*Y1[1]*v);
Info << " m_char/m_bio:      " << rho_char/rho_bio << " % " << endl; */

////////////////////////////////////
////////////////////////////////////

    }

    Info<< "End\n" << endl;

    return 0;
}

// ***** //
```

6.1.reactionsRates.H

```

//Info<< "\nENTROU\n" << endl;

phaseModel& phase0 = fluid.multiComponentPhases()[0]; // particles
UPtrList<volScalarField>& Y0 = phase0.YActiveRef(); // alpha particles
phaseModel& phase1 = fluid.multiComponentPhases()[1]; // air
UPtrList<volScalarField>& Y1 = phase1.YActiveRef(); // alpha air

A_p = (6.0/d_0)*phase0;

T_p = phase0.thermo().T();
T_air = phase1.thermo().T();
T_mean = 0.5*T_p+0.5*T_air;

tx = A*Foam::exp(-E/(R_u*T_p));
r_diff = (C_i/d_0)*Foam::pow(T_mean,0.75);
r_k1 = A1*T_p*Foam::exp(-E1/(R_u*T_p));
r_k2 = A2*T_p*Foam::exp(-E2/(R_u*T_p));
r_k3 = A3*T_p*Foam::exp(-E3/(R_u*T_p));

/*IOdictionary heterogeneousChemicalProperties
(
    IOobject
    (
        "heterogeneousChemicalProperties",
```

```

        runTime.constant(),
        mesh,
        IOobject::MUST_READ_IF_MODIFIED,
        IOobject::NO_WRITE
    )
);*/

// CARBONO
//phaseModel& phase0 = fluid.multiComponentPhases()[0]; //
multiComponentPhases - Return the models for phases that have multiple species
//UPtrList<volScalarField>& Y0 = phase0.YActiveRef(); // YActiveRef -
Access the active species mass fractions
//const dictionary& subDict = heterogeneousChemicalProperties.subDict("C");
// Leitura do Carbono
//dimensionedScalar MMC_("MMC", dimensionSet(1,0,0,0,-1,0,0), scalar(0.0));
//MMC_ = subDict.lookup("MM"); // Indexação da massa molar do Carbono
//dimensionedScalar n_("n", dimensionSet(0,0,0,0,0,0,0), scalar(0.0));

// if (Y0[1].value() > scalar(0.05))
// {
//     tx1 = Y0[1]*A_p*p*Y1[0]*(r_diff*r_k1)/(r_diff+r_k1);
//     tx2 = Y0[1]*A_p*p*Y1[1]*(r_diff*r_k2)/(r_diff+r_k2);*/
// }
else
{
    /*
    tx1 = (0.0/4.0)/d_0*p*Y1[0]*(r_diff*r_k1)/(r_diff+r_k1);
    tx2 = (0.0/4.0)/d_0*p*Y1[1]*(r_diff*r_k2)/(r_diff+r_k2);*/
}

/* forAll(tx1, i)
{
    if (Y0[0][i] < 0.3 and Y0[1][i] > 0.0025 and phase0[i] > 0.0025)
    {
        tx1[i] =
A_p[i]*p[i]*Y1[0][i]*(r_diff[i]*r_k1[i])/(r_diff[i]+r_k1[i]);
        tx2[i] =
A_p[i]*p[i]*Y1[1][i]*(r_diff[i]*r_k2[i])/(r_diff[i]+r_k2[i]);
    }
    else
    {
        tx1[i] =
0.0*A_p[i]*p[i]*Y1[0][i]*(r_diff[i]*r_k1[i])/(r_diff[i]+r_k1[i]);
        tx2[i] =
0.0*A_p[i]*p[i]*Y1[1][i]*(r_diff[i]*r_k2[i])/(r_diff[i]+r_k2[i]);
    }
}*/

// Y0[1] - char
tx1 = A_p*p*Y1[1]*(r_diff*r_k1)/(r_diff+r_k1); // boudouard
Y1[1] - CO2
tx2 = A_p*p*Y1[0]*(r_diff*r_k2)/(r_diff+r_k2); // reforming of char
Y1[0] - H2O
tx3 = A_p*p*Y1[3]*(r_diff*r_k3)/(r_diff+r_k3); // methanation
Y1[3] - H2

/*forAll(tx, i)
{

```

```

        if (tx[i] > 0.1) //(Y0[0][i] < 0.3 and Y0[1][i] > 0.0025 and phase0[i] >
0.0025)
        {
            tx[i] = 0.1;
        }
    }*/

    //tx1.correctBoundaryConditions();
    //tx2.correctBoundaryConditions();
    //tx.correctBoundaryConditions();

    // calculo das taxas
    //rhoY_bio = phase0*phase0.rho()*Y0[1]; // char para teste em 'n'
    rhoY_bio = phase0*phase0.rho()*Y0[0]; // bio
    rhoy_bio_tx = tx*rhoY_bio;

    //rhoY_char = phase0*phase0.rho()*Y0[1]; // se colocar assim dá pau nas
unidades
    rhoY_char = phase0*Y0[1]; // char // original
    //rhoY_char = phase0*phase0.rho()*Y0[1]; // char FOAM FATAL ERROR:
[bio.particles[1 -3 -1 0 0 0 0] ] + [(n1*rhoy_char_tx1)[2 -6 -1 0 0 0 0] ]
    rhoy_char_tx1 = tx1*rhoY_char;
    rhoy_char_tx2 = tx2*rhoY_char;
    rhoy_char_tx3 = tx3*rhoY_char;

// alteração para diminuir a formação de gases
/*volScalarField rhoy_bio_txx
(
    IOobject
    (
        "rhoy_bio_txx",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    rhoy_bio_tx
);

volScalarField rhoy_bio_tx_gas
(
    IOobject
    (
        "rhoy_bio_tx_gas",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    rhoy_bio_tx
);

volScalarField rhoy_bio_tx_particles
(
    IOobject
    (
        "rhoy_bio_tx_particles",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,

```

```

        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    rhoY_bio_tx
);*/

/*sum_phase = 0.0;

    forAll(Y1, i) // roda todas as espécies da fase air
    {
        sum_phase = sum_phase + Y1[i];
    }*/

```

6.2. printInitialMass.H

```

// QUANTIFICAÇÃO DAS MASSAS - INFO
Info << "\nMASSA INICIAL REATOR" << endl;
forAll(fluid.multiComponentPhases(), multiComponentPhasei)
{
    phaseModel& phase = fluid.multiComponentPhases()[multiComponentPhasei];
    UPtrList<volScalarField>& Y = phase.YRef();
    volScalarField& rho = phase.thermoRef().rho();
    Info << "      " << phase.name() << " = " << gSum(phase*rho*v) << " kg" <<
endl; // PARTICLES gSum(phase*rho*v)
    forAll(Y, i) // Loop para rodar todas as espécies da fase
    {
        if (multiComponentPhasei == 0) // somente na fase particles
        {
            const volScalarField& alpha = Y[i];
            Info << "      " << alpha.name() << " = " << gSum(alpha*phase*rho*v)
<< " kg" << endl;
        }
    }
}

//AREIA
phaseModel& phasex = fluid.phases()[2];
volScalarField& rhox = phasex.thermoRef().rho();
Info << "      " << phasex.name() << " = " << gSum(phasex*rhox*v) << " kg" <<
endl;

// COMPOSIÇÃO GERAL SYNGAS
Info << "\nCOMPOSIÇÃO INICIAL SYNGAS" << endl;
forAll(fluid.multiComponentPhases(), multiComponentPhasei)
{
    phaseModel& phase = fluid.multiComponentPhases()[multiComponentPhasei];
    UPtrList<volScalarField>& Y = phase.YRef();
    volScalarField& rho = phase.thermoRef().rho();
    forAll(Y, i) // Loop para rodar todas as espécies da fase
    {
        if (multiComponentPhasei == 1) // somente na fase air
        {
            const volScalarField& alpha = Y[i];
            Info << "      " << alpha.name() << " =      " <<
gSum(alpha*phase*rho*v)/gSum(phase*rho*v) << " kg/kg" << endl;
        }
    }
}

```

```

Info << "\n" << endl;

//CÁLCULO DA RELAÇÃO DE MASSA INICIAL DAS ESPÉCIES (para comparação com tempo
atualizado)
//phaseModel& phase0 = fluid.multiComponentPhases()[0]; // particles
//phaseModel& phase1 = fluid.multiComponentPhases()[1]; // air
const volScalarField& rho_s = phase0.rho();
const volScalarField& rho_a = phase1.rho();
UPtrList<volScalarField>& Yp = phase0.YRef();
UPtrList<volScalarField>& Ya = phase1.YRef();
const scalar miBIO = gSum(Yp[0]*phase0*rho_s*v); // massa da espécie bio
inicial
const scalar miC = gSum(Yp[1]*phase0*rho_s*v); // massa da espécie carvão
inicial
const scalar miH2O = gSum(Ya[0]*phase1*rho_a*v); // massa da espécie H2O
inicial
const scalar miCO2 = gSum(Ya[1]*phase1*rho_a*v); // massa da espécie CO2
inicial
const scalar miCO = gSum(Ya[2]*phase1*rho_a*v); // massa da espécie CO inicial
const scalar miH2 = gSum(Ya[3]*phase1*rho_a*v); // massa da espécie H2 inicial
//const scalar miO2 = gSum(Ya[4]*phase1*rho_a*v)/gSum(v); // massa da espécie
O2 inicial
//const scalar miN2 = gSum(Ya[5]*phase1*rho_a*v)/gSum(v); // massa da espécie
N2 inicial
const scalar miCH4 = gSum(Ya[6]*phase1*rho_a*v); // massa da espécie CH4
inicial

/*
species
(
    H2O
    CO2
    CO
    H2
    O2
    N2
    CH4
);
*/

```

6.3.printInstMass.H

```

// QUANTIFICAÇÃO DAS MASSAS - INFO
Info << "\nMASSA INSTANTÂNEA REATOR" << endl;
forAll(fluid.multiComponentPhases(), multiComponentPhasei)
{
    phaseModel& phase = fluid.multiComponentPhases()[multiComponentPhasei];
    UPtrList<volScalarField>& Y = phase.YRef();
    volScalarField& rho = phase.thermoRef().rho();
    Info << "      " << phase.name() << " = " << gSum(phase*rho*v) << " kg" <<
endl; // PARTICLES gSum(phase*rho*v)
    forAll(Y, i) // Loop para rodar todas as espécies da fase
    {
        if (multiComponentPhasei == 0) // somente na fase particles
        {
            const volScalarField& alpha = Y[i];
            Info << "          " << alpha.name() << " = " << gSum(alpha*phase*rho*v)
<< " kg" << endl;

```

```

        /*
        // TESTE
        Info << "      " << alpha.name() << " = " << average(rho) << " rho"
<< endl;
        Info << "      " << alpha.name() << " = " << average(alpha) << "
Y[i]" << endl;
        Info << "      " << alpha.name() << " = " << average(phase) << "
phase 'bio'" << endl;
        */

    }

    /*
    Info << "      " << average(rhoY_bio) << " rhoY_bio" << endl;

    Info << "      " << average(tx) << " tx" << endl;
    Info << "      " << average(rhoy_bio_tx) << " rhoy_bio_tx" << endl;
    Info << "      " << average(rhoY_char) << " rhoY_char" << endl;

    Info << "      " << average(tx1) << " tx1" << endl;
    Info << "      " << average(rhoy_char_tx1) << " rhoy_char_tx1" <<
endl;
    Info << "      " << average(rhoY_char) << " rhoY_char" << endl;

    Info << "      " << average(tx2) << " tx2" << endl;
    Info << "      " << average(rhoy_char_tx2) << " rhoy_char_tx2" <<
endl;
    Info << "      " << average(rhoY_char) << " rhoY_char" << endl;

    Info << "      " << average(tx3) << " tx3" << endl;
    Info << "      " << average(rhoy_char_tx3) << " rhoy_char_tx3" <<
endl;
    */
    }
//AREIA
phaseModel& phasex = fluid.phases()[2];
volScalarField& rhox = phasex.thermoRef().rho();
Info << "      " << phasex.name() << " = " << gSum(phasex*rhox*v) << " kg" <<
endl;

// COMPOSIÇÃO GERAL SYNGAS - Integral em todos os volumes da malha
Info << "\nCOMPOSIÇÃO GERAL INTERNA SYNGAS" << endl;
forAll(fluid.multiComponentPhases(), multiComponentPhasei)
{
    phaseModel& phase = fluid.multiComponentPhases()[multiComponentPhasei];
    UPtrList<volScalarField>& Y = phase.YRef();
    volScalarField& rho = phase.thermoRef().rho();
    forAll(Y, i) // Loop para rodar todas as espécies da fase
    {
        if (multiComponentPhasei == 1) // somente na fase air
        {
            const volScalarField& alpha = Y[i];
            Info << "      " << alpha.name() << " =      " <<
gSum(alpha*phase*rho*v)/gSum(phase*rho*v) << " kg/kg" << endl;
        }
    }
}

Info << "\nENTRADA FASES INLET" << endl;
forAll(fluid.multiComponentPhases(), multiComponentPhasei)
{

```

```

phaseModel& phase = fluid.multiComponentPhases()[multiComponentPhasei];
//UPtrList<volScalarField>& Y = phase.YRef(); // unused variable
const scalarField& phasexx = phase.boundaryField()[inletPatchID];
const volScalarField& rho = phase.rho();
const scalarField& rhoi = rho.boundaryField()[inletPatchID];
//forAll(Y, i) // Loop para rodar todas as espécies da fase
//{
//    //if (multiComponentPhasei == 1) // somente na fase air
//    //{
//        //const volScalarField& alpha = Y[i];
//        //const scalarField& Yip =
alpha.boundaryField()[inletPatchID];
//        const scalarField& inletPatchPhi =
phi.boundaryField()[inletPatchID];
//        scalar inletMass = gSum(phasexx*rhoi*inletPatchPhi); //
Massa
//        scalar inletMass = gSum(phasexx*rhoi*inletPatchPhi/(1e-30 +
phasexx)); // sem alpha para bater com controlDict
//        Info << "      " << phase.name() << " = " << inletMass << "
kg/s" << endl;
//    }
//}

// COMPOSIÇÃO GAS INLET
Info << "\nCOMPOSIÇÃO GAS INLET" << endl;
forAll(fluid.multiComponentPhases(), multiComponentPhasei)
{
    phaseModel& phase = fluid.multiComponentPhases()[multiComponentPhasei];
    UPtrList<volScalarField>& Y = phase.YRef();
    const scalarField& phasexx = phase.boundaryField()[inletPatchID];
    const volScalarField& rho = phase.rho();
    const scalarField& rhoi = rho.boundaryField()[inletPatchID];
    forAll(Y, i) // Loop para rodar todas as espécies da fase
    {
        //if (multiComponentPhasei == 1) // somente na fase air
        //{
            const volScalarField& alpha = Y[i];
            const scalarField& Yip = alpha.boundaryField()[inletPatchID];
            const scalarField& inletPatchPhi =
phi.boundaryField()[inletPatchID];
//            scalar inletMass = gSum(phasexx*rhoi*Yip*inletPatchPhi); //
Massa
//            scalar inletMass = gSum(phasexx*Yip*rhoi*inletPatchPhi/(1e-30
+ phasexx)); // sem o alpha para bater com control dict
//            Info << "      " << alpha.name() << " = " << inletMass << "
kg/s" << endl;
//        }
//    }
}

// COMPOSIÇÃO OUTLET
Info << "\nCOMPOSIÇÃO GAS OUTLET" << endl;
forAll(fluid.multiComponentPhases(), multiComponentPhasei)
{
    phaseModel& phase = fluid.multiComponentPhases()[multiComponentPhasei];
    UPtrList<volScalarField>& Y = phase.YRef();

```

```

const scalarField& phasexy = phase.boundaryField()[outletPatchID];
const volScalarField& rho = phase.rho();
const scalarField& rhoi = rho.boundaryField()[outletPatchID];
forAll(Y, i) // Loop para rodar todas as espécies da fase
{
    const volScalarField& alpha = Y[i];
    const scalarField& Yip = alpha.boundaryField()[outletPatchID];
    const scalarField& outletPatchPhi =
phi.boundaryField()[outletPatchID];
    scalar outletMass = gSum(phasexy*rhoi*Yip*outletPatchPhi); //
Mássica
    //scalar outletMass = gSum(phasexy*Yip*outletPatchPhi); //
Volumétrica
    Info << "      " << alpha.name() << " = " << outletMass << " kg/s" <<
endl;
}
}

Info << "\n" << endl;

```

6.4. Arquivos de escrita de dados

6.4.1. *devolatilization.H*

```
// BALANÇO FINAL
//Info << "\n" << endl;
// DEVOLATILIZATION: biomass -> 0.2H2O + 0.313CO + 0.146CO2 + 0.035CH4 +
0.106H2 + 0.2C
Info <<
"=====DEVOLATILIZATION=====
<< endl;
Info << "idmBIO = " << idmBIO << endl; // deve ser negativo
Info << "dmH2O = " << dmH2O << endl;
Info << "dmCO = " << dmCO << endl;
Info << "dmCO2 = " << dmCO2 << endl;
Info << "dmCH4 = " << dmCH4 << endl;
Info << "dmH2 = " << dmH2 << endl;
Info << "idmC = " << idmC << endl;
Info << "ZERAGEM: " << idmBIO << " = " << dmH2O + dmCO + dmCO2 + dmCH4 + dmH2 +
idmC << endl; // deve ser igual em módulo
scalar ERR_REL = (mag(idmBIO)-(dmH2O + dmCO + dmCO2 + dmCH4 + dmH2 +
idmC))/((dmH2O + dmCO + dmCO2 + dmCH4 + dmH2 + idmC)+1e-30)*100;
Info << "\nERRO RELATIVO: " << ERR_REL << " % " << endl; // deve ser igual em
módulo
//Info << "\n" << endl;
Info << "=====
<< endl;

// OUTPUT ARQUIVO
//"# Time REAGENTES PRODUTOS mCO phiCO miC mC phiInCO2
phiOutCO2"
outputFilePtrN() << runTime.timeName();
//outputFilePtrN1() << " " << reagentes << " " << produtos << " "
<< mCO << " " << phiCO << " " << miC << " " << mC << " " <<
phiInCO2 << " " << phiOutCO2 << endl;
outputFilePtrN() << " " << idmBIO << " " << dmH2O << " " << dmCO << " "
<< dmCO2 << " " << dmCH4 << " " << dmH2 << " " << idmC << " " <<
ERR_REL << endl; // mais simplificado
```

6.4.2. *boudouard.H*

```
// BALANÇO FINAL
Info << "\n" << endl;
Info << "=====BOUDOUARD=====
<< endl;
Info << "dmC = " << idmC << endl; // deve ser negativo - ok
Info << "dmCO2 = " << dmCO2 << endl;
Info << "dmCO = " << dmCO << endl;
Info << "ZERAGEM: " << idmC + dmCO2 << " = " << dmCO << endl; // deve ser igual
em módulo
scalar ERR_REL1 = (mag(idmC + dmCO2)-dmCO)/(dmCO+1e-30)*100;
Info << "\nERRO RELATIVO: " << ERR_REL1 << " % " << endl; // deve ser igual em
módulo
//Info << "\n" << endl;
```

```

Info << "=====
<< endl;

// OUTPUT ARQUIVO
//"# Time REAGENTES PRODUTOS mCO phiCO miC mC phiInCO2
phiOutCO2"
outputFilePtrN1() << runTime.timeName();
//outputFilePtrN1() << " " << reagentes << " " << produtos << " "
<< mCO << " " << phiCO << " " << miC << " " << mC << " " <<
phiInCO2 << " " << phiOutCO2 << endl;
outputFilePtrN1() << " " << idmC << " " << dmCO2 << " " << dmCO << " "
<< ERR_REL1 << endl; // mais simplificado

```

6.4.3. reforming.H

```

// BALANÇO FINAL
Info << "\n" << endl;
Info << "=====REFORMING OF CHAR=====
<< endl;
Info << "dmC = " << idmC << endl; // deve ser negativo
Info << "dmH2O = " << dmH2O << endl;
Info << "dmCO = " << dmCO << endl;
Info << "dmH2 = " << dmH2 << endl;
Info << "ZERAGEM: " << idmC + dmH2O << " = " << dmCO + dmH2 << endl; // deve
ser igual em módulo
scalar ERR_REL2 = (mag(idmC + dmH2O) - (dmCO + dmH2)) / (dmCO + dmH2 + 1e-30) * 100;
Info << "\nERRO RELATIVO: " << ERR_REL2 << " % " << endl; // deve ser igual em
módulo
//Info << "\n" << endl;
Info << "=====
<< endl;

//Info << "MASSA REAGENTES = " << reagentes << "\nMASSA PRODUTOS = " <<
produtos << " \nDIFF = " << (reagentes - produtos) << " \n" << endl;

//"# Time REAGENTES PRODUTOS mCO mH2 phiCO phiH2 miC mC miH2O
mH2O phiInH2O phiOutH2O"
outputFilePtrN2() << runTime.timeName();
//outputFilePtrN2() << " " << reagentes << " " << produtos << " "
<< mCO << " " << mH2 << " " << phiCO << " " << phiH2 << " " << miC
<< " " << mC << " " << miH2O << " " << mH2O << " " << phiInH2O << " "
<< phiOutH2O << endl;
outputFilePtrN2() << " " << idmC << " " << dmH2O << " " << dmCO << " "
<< dmH2 << " " << ERR_REL2 << endl; // mais simplificado

```

6.4.4. methanation.H

```

// BALANÇO FINAL
Info << "\n" << endl;
Info << "=====METHANATION=====
<< endl;
Info << "dmC = " << idmC << endl; // deve ser negativo - ok

```

```

Info <<"dmH2 = " << dmH2 << endl;
Info <<"dmCH4 = " << dmCH4 << endl;
Info << "ZERAGEM: " << idmC + dmH2 << " = " << dmCH4 << endl; // deve ser igual
em módulo
scalar ERR_REL3 = (mag(idmC + dmH2)-dmCH4)/(dmCH4+1e-30)*100;
Info << "\nERRO RELATIVO: " << ERR_REL3 << " % " << endl; // deve ser igual em
módulo
Info << "=====
<< endl;
//Info << "\n" << endl;

// OUTPUT ARQUIVO
//"# Time REAGENTES PRODUTOS mCH4 phiCH4 miC mC phiInH2
phiOutH2"
outputFilePtrN3() << runTime.timeName();
//outputFilePtrN1() << " " << reagentes << " " << produtos << " "
<< mCH4 << " " << phiCH4 << " " << miC << " " << mC << " " <<
phiInH2 << " " << phiOutH2 << endl;
outputFilePtrN3() << " " << idmC << " " << dmH2 << " " << dmCH4 << " "
<< ERR_REL3 << endl; // mais simplificado

```

6.4.5. waterGasShift.H

```

// BALANÇO FINAL
// waterGasShift // CO + H2O <-> CO2 + H2
Info << "\n" << endl;
Info << "=====WATER-GAS
SHIFT===== " << endl;
Info <<"dmCO = " << dmCO << endl;
Info <<"dmH2O = " << dmH2O << endl;
Info <<"dmCO2 = " << dmCO2 << endl;
Info <<"dmH2 = " << dmH2 << endl;
Info << "\nZERAGEM: " << dmCO + dmH2O << " = " << dmCO2 + dmH2 << endl; // deve
ser igual em módulo
scalar ERR_REL11 = (mag(dmCO + dmH2O)-(dmCO2 + dmH2))/(dmCO2 + dmH2 + 1e-
30)*100;
Info << "\nERRO RELATIVO: " << ERR_REL11 << " % " << endl; // deve ser zero
//Info << "\n" << endl;
Info << "=====
<< endl;

// OUTPUT ARQUIVO
//"# Time REAGENTES PRODUTOS mCO2 phiCO2 miC mC phiInH2O
phiOutH2O"
outputFilePtrT1() << runTime.timeName();
outputFilePtrT1() << " " << dmCO << " " << dmH2O << " " << dmCO2 << " "
<< dmH2 << " " << ERR_REL11 << endl; // mais simplificado

```

6.4.6. methaneSteamReforming.H

```

// BALANÇO FINAL
// methaneSteamReforming // CH4 + H2O -> CO + 3H2

```

```

Info << "\n" << endl;
Info << "=====METHANE-STEAM
REFORMING===== " << endl;
//Info << "\n" << endl;
Info <<"dmCH4 = " << dmCH4 << endl;
Info <<"dmH2O = " << dmH2O << endl;
Info <<"dmCO = " << dmCO << endl;
Info <<"dmH2 = " << dmH2 << endl;
Info << "\nZERAGEM: " << dmCH4 + dmH2O << " = " << dmCO + dmH2 << endl; // deve
ser igual em módulo
scalar ERR_REL12 = (mag(dmCH4 + dmH2O)-(dmCO + dmH2))/(dmCO + dmH2 + 1e-
30)*100;
Info << "\nERRO RELATIVO: " << ERR_REL12 << " % " << endl; // deve ser zero
Info << "===== "
<< endl;
Info << "\n" << endl;

// OUTPUT ARQUIVO
outputFilePtrT2() << runTime.timeName();
outputFilePtrT2() << " " << dmCH4 << " " << dmH2O << " " << dmCO << " "
<< dmH2 << " " << ERR_REL12 << endl; // mais simplificado

```

6.5.createfields.H

```

#include "createRDeltaT.H"
#include "readGravitationalAcceleration.H"
#include "readhRef.H"

Info<< "Creating phaseSystem\n" << endl;

autoPtr<phaseSystem> fluidPtr
(
    phaseSystem::New(mesh)
);
phaseSystem& fluid = fluidPtr();
phaseSystem::phaseModelList& phases = fluid.phases();

dimensionedScalar pMin
(
    "pMin",
    dimPressure,
    fluid
);

#include "gh.H"

volScalarField& p = phases[0].thermoRef().p();

Info<< "Reading field p_rgh\n" << endl;
volScalarField p_rgh
(
    IOobject
    (
        "p_rgh",
        runTime.timeName(),
        mesh,

```

```

        IOobject::MUST_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh
);

/*Info<< "Reading field tx_react\n" << endl;
volScalarField tx_react
(
    IOobject
    (
        "tx_react",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::MUST_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh
);*/

label pRefCell = 0;
scalar pRefValue = 0.0;
if (fluid.incompressible())
{
    p = max(p_rgh + fluid.rho()*gh, pMin);

    if (p_rgh.needReference())
    {
        setRefCell
        (
            p,
            p_rgh,
            pimple.dict(),
            pRefCell,
            pRefValue
        );

        p += dimensionedScalar
        (
            "p",
            p.dimensions(),
            pRefValue - getRefCellValue(p, pRefCell)
        );
        p_rgh = p - fluid.rho()*gh;
    }
}
mesh.setFluxRequired(p_rgh.name());

PtrList<volScalarField> rAUs;
PtrList<surfaceScalarField> rAUfs;

Info<< "Reading heterogeneousChemicalProperties\n" << endl;

IOdictionary heterogeneousChemicalProperties
(
    IOobject
    (
        "heterogeneousChemicalProperties",
        runTime.constant(),
        mesh,
        IOobject::MUST_READ_IF_MODIFIED,

```

```

        IOobject::NO_WRITE
    )
);
Info<< "Reading A\n" << endl;
dimensionedScalar A
(
    "A",
    dimTime/dimTime/dimTime,
    heterogeneousChemicalProperties.lookup("A")
);

Info<< "Reading E\n" << endl;
dimensionedScalar E
(
    "E",
    dimEnergy/dimMoles,
    heterogeneousChemicalProperties.lookup("E")
);

Info<< "Reading R_u\n" << endl;
dimensionedScalar R_u
(
    "R_u",
    dimEnergy/dimMoles/dimTemperature,
    heterogeneousChemicalProperties.lookup("R_u")
);

Info<< "Reading d_0\n" << endl;
dimensionedScalar d_0
(
    "d_0",
    dimLength,
    heterogeneousChemicalProperties.lookup("d_0")
);

Info<< "Reading C_i\n" << endl;
dimensionedScalar C_i
(
    "C_i",
    dimensionSet(0, 0, 1, -0.75, 0, 0, 0),
    heterogeneousChemicalProperties.lookup("C_i")
);

Info<< "Reading A1\n" << endl;
dimensionedScalar A1
(
    "A1",
    dimensionSet(0, -1, 1, -1, 0, 0, 0),
    heterogeneousChemicalProperties.lookup("A1")
);

Info<< "Reading E1\n" << endl;
dimensionedScalar E1
(
    "E1",
    dimEnergy/dimMoles,
    heterogeneousChemicalProperties.lookup("E1")
);

Info<< "Reading A2\n" << endl;

```

```

dimensionedScalar A2
(
    "A2",
    dimensionSet(0, -1, 1, -1, 0, 0, 0),
    heterogeneousChemicalProperties.lookup("A2")
);

Info<< "Reading A3\n" << endl;
dimensionedScalar A3
(
    "A3",
    dimensionSet(0, -1, 1, -1, 0, 0, 0),
    heterogeneousChemicalProperties.lookup("A3")
);

Info<< "Reading E2\n" << endl;
dimensionedScalar E2
(
    "E2",
    dimEnergy/dimMoles,
    heterogeneousChemicalProperties.lookup("E2")
);

Info<< "Reading E3\n" << endl;
dimensionedScalar E3
(
    "E3",
    dimEnergy/dimMoles,
    heterogeneousChemicalProperties.lookup("E3")
);

phaseModel& phase0 = fluid.multiComponentPhases()[0]; // particle
phaseModel& phase1 = fluid.multiComponentPhases()[1]; // air
UPtrList<volScalarField>& Y0 = phase0.YActiveRef();
UPtrList<volScalarField>& Y1 = phase1.YActiveRef();

    //rhoY_bio = ;

Info<< "Reading field rhoY_bio\n" << endl;
volScalarField rhoY_bio
(
    IOobject
    (
        "rhoY_bio",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    phase0*phase0.rho()*Y0[0] // bio
);

//const scalarField& vv = mesh.V();
Info<< "Reading field rhoY_char\n" << endl;
volScalarField rhoY_char
(
    IOobject
    (
        "rhoY_char",
        runTime.timeName(),

```

```

        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    //phase0*phase0.rho()*Y0[1] // carvao
    phase0*Y0[1] // original
    //phase0*phase0.rho()*Y0[1] //teste FOAM FATAL ERROR: [bio.particles[1 -3 -
1 0 0 0 0] ] + [(n1*rhoy_char_tx1)[2 -6 -1 0 0 0 0] ]
);

volScalarField T_p
(
    IOobject
    (
        "T_p",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::NO_WRITE
    ),
    phase0.thermo().T()
);

volScalarField T_air
(
    IOobject
    (
        "T_air",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::NO_WRITE
    ),
    phase1.thermo().T()
);

volScalarField T_mean
(
    IOobject
    (
        "T_mean",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::NO_WRITE
    ),
    0.5*T_p+0.5*T_air
);

volScalarField r_diff
(
    IOobject
    (
        "r_diff",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::NO_WRITE
    ),
    (C_i/d_0)*Foam::pow(T_mean,0.75) // dp do artigo ku2015 varia. e aqui está
    constante

```

```

);

volScalarField r_k1
(
    IOobject
    (
        "r_k1",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::NO_WRITE
    ),
    A1*T_p*Foam::exp(-E1/(R_u*T_p))
);

volScalarField r_k2
(
    IOobject
    (
        "r_k2",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::NO_WRITE
    ),
    A2*T_p*Foam::exp(-E2/(R_u*T_p))
);

volScalarField r_k3
(
    IOobject
    (
        "r_k3",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::NO_WRITE
    ),
    A3*T_p*Foam::exp(-E3/(R_u*T_p))
);

Info<< "Reading field tx\n" << endl;
volScalarField tx
(
    IOobject
    (
        "tx",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    A*Foam::exp(-E/(R_u*T_p)) //não deveria ser isso?
);

Info<< "Reading field rhoy_bio_tx\n" << endl;
volScalarField rhoy_bio_tx
(
    IOobject

```

```

(
    "rhou_bio_tx",
    runTime.timeName(),
    mesh,
    IOobject::NO_READ,
    IOobject::AUTO_WRITE
),
tx*rhou_bio
);

//const scalarField& vv = mesh.V();
//const scalar Pi = constant::mathematical::pi;
//scalar Pi = mathematicalConstant::pi;
//constant::mathematical::pi

volScalarField A_p
(
    IOobject
    (
        "A_p",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::NO_WRITE
    ),
    (6.0/d_0)*phase1 // original
//phase0*phase0.rho()*Y0[1]
// Pi*Foam::pow(6/Pi*phase1, (2/3))
);

Info<< "Reading field tx1\n" << endl; // boudouard
volScalarField tx1
(
    IOobject
    (
        "tx1",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    A_p*p*Y1[1]*(r_diff*r_k1)/(r_diff+r_k1)
//phase0*Y0[1]*A_p*p*Y1[1]*(r_diff*r_k1)/(r_diff+r_k1) // coloquei igual em
reactionsRates.H // << MAIS ATUAL >>
// estava assim 03/10/2022 // (6/4)/d_0*Y1[1]*p*(r_diff*r_k1)/(r_diff+r_k1) //
original Y1[1] - CO2
//(6/4)/d_0*Y0[1]*p*(r_diff*r_k1)/(r_diff+r_k1)
//(6.0/d_0)*phase0*p*(r_diff*r_k1)/(r_diff+r_k1) // esse deu certo
//(6.0/d_0)*Y0[1]*p*(r_diff*r_k1)/(r_diff+r_k1) // Y do carvao
//A_p*p*(r_diff*r_k1)/(r_diff+r_k1)
);

Info<< "Reading field rhou_char_tx1\n" << endl;
volScalarField rhou_char_tx1
(
    IOobject
    (
        "rhou_char_tx1",
        runTime.timeName(),
        mesh,

```

```

        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    tx1*rhoY_char
);

Info<< "Reading field tx2\n" << endl; // reforming of char
volScalarField tx2
(
    IOobject
    (
        "tx2",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    //(6/4)/d_0*Y1[0]*p*(r_diff*r_k2)/(r_diff+r_k2) // Y1[0] - H2O
    A_p*p*Y1[0]*(r_diff*r_k2)/(r_diff+r_k2)
    //phase1*Y0[1]*A_p*p*Y1[0]*(r_diff*r_k2)/(r_diff+r_k2) // igual
    reactionsRates.H // << MAIS ATUAL >>
);

Info<< "Reading field rhoy_char_tx2\n" << endl;
volScalarField rhoy_char_tx2
(
    IOobject
    (
        "rhoy_char_tx2",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    tx2*rhoY_char
);

Info<< "Reading field tx3\n" << endl; // methanation
volScalarField tx3
(
    IOobject
    (
        "tx3",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    //(6/4)/d_0*Y1[6]*p*(r_diff*r_k3)/(r_diff+r_k3) // Y1[6] - CH4
    A_p*p*Y1[3]*(r_diff*r_k3)/(r_diff+r_k3)
    //phase1*Y0[1]*A_p*p*Y1[3]*(r_diff*r_k3)/(r_diff+r_k3) // igual
    reactionsRates.H // << MAIS ATUAL >>
);

Info<< "Reading field rhoy_char_tx3\n" << endl;
volScalarField rhoy_char_tx3
(
    IOobject
    (

```

```

        "rhoy_char_tx3",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    tx3*rhoY_char
);

/*volScalarField sum_phase
(
    IOobject
    (
        "sum_phase",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    Y1[4]
);*/

// alteração para diminuir a formação de gases
volScalarField rhoy_bio_txx
(
    IOobject
    (
        "rhoy_bio_txx",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    rhoy_bio_tx
);

volScalarField rhoy_bio_tx_gas
(
    IOobject
    (
        "rhoy_bio_tx_gas",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    rhoy_bio_tx
);

volScalarField rhoy_bio_tx_particles
(
    IOobject
    (
        "rhoy_bio_tx_particles",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    rhoy_bio_tx

```

```

);

volScalarField rhoy_char_txx1
(
    IOobject
    (
        "rhoy_char_txx1",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    rhoy_char_tx1
);

volScalarField rhoy_char_txx2
(
    IOobject
    (
        "rhoy_char_txx2",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    rhoy_char_tx2
);

volScalarField rhoy_char_txx3
(
    IOobject
    (
        "rhoy_char_txx3",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    rhoy_char_tx3
);

```

6.6.YEqns.H

```

{
    autoPtr<phaseSystem::specieTransferTable>
        specieTransferPtr(fluid.specieTransfer());

    phaseSystem::specieTransferTable&
        specieTransfer(specieTransferPtr());

    fluid.correctReactions();

    Info<< "Reading heterogeneousChemicalProperties" << endl;

    IOdictionary heterogeneousChemicalProperties
    (
        IOobject
        (

```

```

        "heterogeneousChemicalProperties",
        runTime.constant(),
        mesh,
        IOobject::MUST_READ_IF_MODIFIED,
        IOobject::NO_WRITE
    )
);

// CARBONO
//phaseModel& phase1 = fluid.multiComponentPhases()[0]; //
multiComponentPhases - Return the models for phases that have multiple species
//UPtrList<volScalarField>& Y1 = phase1.YActiveRef(); // YActiveRef -
Access the active species mass fractions
//rhoY_bio = phase0.5*phase1.rho()*Y1[0];
//          Info<<Y1[0].name()<< nl << endl; // bio
//          Info<<phase1.name()<< nl << endl; // particle
//const dictionary& subDict = heterogeneousChemicalProperties.subDict("C");
// Leitura do Carbono
//dimensionedScalar MMC_("MMC", dimensionSet(1,0,0,0,-1,0,0), scalar(0.0));
//MMC_ = subDict.lookup("MM"); // Indexação da massa molar do Carbono

forAll(fluid.multiComponentPhases(), multiComponentPhasei) // Loop para rodar
todas as fases
{
    phaseModel& phase = fluid.multiComponentPhases()[multiComponentPhasei];
// Identificação da phase
    UPtrList<volScalarField>& Y = phase.YActiveRef(); // Access the active
species mass fractions
    const volScalarField& alpha = phase;
    const volScalarField& rho = phase.rho();

    if (phase.name() == "particles")
    {
        rhoy_bio_txx = 0.001*rhoy_bio_tx_particles; // devolatilization
        rhoy_char_txx1 = 0.001*rhoy_char_tx1; // boudouard
        rhoy_char_tx2 = 0.001*rhoy_char_tx2; // reforming
        rhoy_char_tx3 = 0.001*rhoy_char_tx3; // methanation
        //Info<< "ENTROU2 " << nl << endl;
        //Info<< phase.name() << nl << endl;
    }
    if (phase.name() == "air")
    {
        rhoy_bio_txx = 0.1*rhoy_bio_tx_gas; // devolatilization
        rhoy_char_txx1 = 0.1*rhoy_char_tx1; // boudouard
        rhoy_char_tx2 = 0.1*rhoy_char_tx2; // reforming
        rhoy_char_tx3 = 0.1*rhoy_char_tx3; // methanation
        //Info<< "ENTROU1 " << nl << endl;
        //Info<< phase.name() << nl << endl;
    }

    forAll(Y, i) // Loop para rodar todas as espécies da fase
    {
        //Info<< "\nYEqns.H\n" << endl;
        //#include "reactionsRates.H"

//#include "reactionsRates.H"
//tx1.correctBoundaryConditions();
//tx2.correctBoundaryConditions();
//tx3.correctBoundaryConditions();
//tx.correctBoundaryConditions();

```

```

//rhoy_bio_tx.correctBoundaryConditions();

    const dictionary& subDict =
heterogeneousChemicalProperties.subDict(Y[i].name());
    dimensionedScalar n_("n", dimensionSet(0,0,0,0,0,0,0),
scalar(0.0));
    dimensionedScalar n1_("n1", dimensionSet(0,0,0,0,0,0,0),
scalar(0.0));
    dimensionedScalar n2_("n2", dimensionSet(0,0,0,0,0,0,0),
scalar(0.0));
    dimensionedScalar n3_("n3", dimensionSet(0,0,0,0,0,0,0),
scalar(0.0));
    dimensionedScalar MM_("MM", dimensionSet(1,0,0,0,-1,0,0),
scalar(0.0));
    n_ = subDict.lookup("n");
    n1_ = subDict.lookup("n1");
    n2_ = subDict.lookup("n2");
    n3_ = subDict.lookup("n3");
    MM_ = subDict.lookup("MM");
    //Info<<n_<< n1 << endl;

    /*if (Y[i].name() == "carvao.particles")
    {
        rhoy_bio_txx = 0.01*rhoy_bio_tx_particles; // devolatilization
        rhoy_char_txx1 = 0.01*rhoy_char_tx1; // boudouard
        rhoy_char_tx2 = 0.01*rhoy_char_tx2; // reforming
        rhoy_char_tx3 = 0.01*rhoy_char_tx3; // methanation
        //Info<< "ENTROU " << n1 << endl;
        //Info<< Y[i].name() << n1 << endl;
    }
    if (Y[i].name() == "bio.particles")
    {
        rhoy_bio_txx = 0.01*rhoy_bio_tx_particles; // devolatilization
        rhoy_char_txx1 = 0.01*rhoy_char_tx1; // boudouard
        //n1_=0*n1_; // não mudou nada
        rhoy_char_tx2 = 0.01*rhoy_char_tx2; // reforming
        rhoy_char_tx3 = 0.01*rhoy_char_tx3; // methanation
        //Info<< "ENTROU " << n1 << endl;
        //Info<< rhoy_char_txx1 << n1 << endl;
    } */

    //rhoy_bio_txx = 0*rhoy_bio_tx_particles; //teste para zerar bio (não
zerou)

    fvScalarMatrix YiEqn
    (
        phase.YiEqn(Y[i])
        ==

        *specieTransfer[Y[i].name()]
        + fvOptions(alpha, rho, Y[i])

        // TERMOS FONTES DE ESPÉCIES
        //+ n_*MM_*tx
        // + n1_*(MM_/MMC_)*tx1
        // + n2_*(MM_/MMC_)*tx2

        // formulação implícita (fvc)
        + n_*fvc::Sp(n_,rhoy_bio_txx) // devolatilização (n)

```

```

        + n1_*fvc::Sp(n1_,rhou_char_txx1) // boudouard (n1)
        + n2_*fvc::Sp(n2_,rhou_char_tx2) // reforming (n2)
        + n3_*fvc::Sp(n3_,rhou_char_tx3) // methanation (n3)

/*Using "fvc::" will calculate the derivative using the current values. While
"fvm::" will discretize the term into the matrix equation. So "fvc::" will
generate a field, while "fvm::" will return matrix coefficients. So, if you're
solving [M] [Q] = [B]
    fvm:: generates coefficients for [M]
    fvc:: goes in [B]*/
        );

        YiEqn.relax();
        YiEqn.solve("Yi");
    }
}
//tx.correctBoundaryConditions();
fluid.correctSpecies();
}

```

6.7.heterogeneousChemicalProperties

```

/*-----*- C++ -*-----*\
=====
\\      / F ield      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
\\      / O peration  | Website:  https://openfoam.org
\\      / A nd        | Version:   8
\\      / M anipulation |
\*-----*/
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "constant";
    object       heterogeneousChemicalProperties;
}
// * * * * *

// Minimum allowable pressure

// DEVOLATILIZATION: biomass -> 0.2H2O + 0.313CO + 0.146CO2 + 0.035CH4 +
0.106H2 + 0.2C      (n)
A      5e6;
E      1.2e8;
R_u    8314.462;

d_0 1e-3; // REVISAR ESSE PARÂMETRO

// BOUDOUARD: C(s) + CO2(g) -> 2CO(g)      (n1)
A2      8.3;
E2      4.37e7;

// REFORMING OF CHAR: C(s) + H2O(g) -> CO(g) + H2 (g)      (n2)
A1      45.6;
E1      4.37e7;

```

```

// METHANATION: C(s) + 2H2(g) -> CH4(g) (n3)
A3      8.3;
E3      4.37e7;

C_i 5e-12; // tanto para (i) como (ii)

H2O.air
{
    n      n      [0 0 0 0 0 0 0] 0.01;
    MM      MM      [1 0 0 0 -1 0 0] 18.0;
    n1      n1      [0 0 0 0 0 0 0] 0;
    n2      n2      [0 0 0 0 0 0 0] 0; //-1.0;
    n3      n3      [0 0 0 0 0 0 0] 0;
}
CO2.air
{
    n      n      [0 0 0 0 0 0 0] 0.007; //0.5;
    MM      MM      [1 0 0 0 -1 0 0] 44;
    n1      n1      [0 0 0 0 0 0 0] 0;
    n2      n2      [0 0 0 0 0 0 0] 0;
    n3      n3      [0 0 0 0 0 0 0] 0;
}
CO.air
{
    n      n      [0 0 0 0 0 0 0] 0.1232;
    MM      MM      [1 0 0 0 -1 0 0] 28.0;
    n1      n1      [0 0 0 0 0 0 0] 0;
    n2      n2      [0 0 0 0 0 0 0] 0;
    n3      n3      [0 0 0 0 0 0 0] 0;
}
H2.air
{
    n      n      [0 0 0 0 0 0 0] 0.0686843388;
    MM      MM      [1 0 0 0 -1 0 0] 2.0;
    n1      n1      [0 0 0 0 0 0 0] 0;
    n2      n2      [0 0 0 0 0 0 0] 0; //0.1;
    n3      n3      [0 0 0 0 0 0 0] 0; //-0.08;
}
O2.air
{
    n      n      [0 0 0 0 0 0 0] 0.01; //-0.5; //1; //1.9; //1.8; //-1.5; //1.5; //2; //-
3; //-4.5 ; //-3;
    MM      MM      [1 0 0 0 -1 0 0] 32.0;
    n1      n1      [0 0 0 0 0 0 0] 0; // zerei todos coeficientes das reações n1
e n2 para verificar apenas a devolatização (n)
    n2      n2      [0 0 0 0 0 0 0] 0;
    n3      n3      [0 0 0 0 0 0 0] 0;
}
N2.air
{
    n      n      [0 0 0 0 0 0 0] 0.2;
    MM      MM      [1 0 0 0 -1 0 0] 28.0;
    n1      n1      [0 0 0 0 0 0 0] 0;
    n2      n2      [0 0 0 0 0 0 0] 0;
    n3      n3      [0 0 0 0 0 0 0] 0;
}
CH4.air
{
    n      n      [0 0 0 0 0 0 0] 0.065739440829026; //0.035;
    MM      MM      [1 0 0 0 -1 0 0] 16.0;
}

```

```

    n1      n1  [0 0 0 0 0 0 0] 0;
    n2      n2  [0 0 0 0 0 0 0] 0;
    n3      n3  [0 0 0 0 0 0 0] 0;
}
C2H4.air
{
    n      n  [0 0 0 0 0 0 0] 0.0436243671864;
    MM     MM [1 0 0 0 -1 0 0] 28.05;
    n1     n1  [0 0 0 0 0 0 0] 0;
    n2     n2  [0 0 0 0 0 0 0] 0;
    n3     n3  [0 0 0 0 0 0 0] 0;
}
C2H6.air
{
    n      n  [0 0 0 0 0 0 0] 0.01287616176;
    MM     MM [1 0 0 0 -1 0 0] 30.07;
    n1     n1  [0 0 0 0 0 0 0] 0;
    n2     n2  [0 0 0 0 0 0 0] 0;
    n3     n3  [0 0 0 0 0 0 0] 0;
}
C3H8.air
{
    n      n  [0 0 0 0 0 0 0] 0.02659457598336;
    MM     MM [1 0 0 0 -1 0 0] 44.097;
    n1     n1  [0 0 0 0 0 0 0] 0;
    n2     n2  [0 0 0 0 0 0 0] 0;
    n3     n3  [0 0 0 0 0 0 0] 0;
}
bio.particles
{
    n      n  [0 0 0 0 0 0 0] 0.1;//0.075;
    MM     MM [1 0 0 0 -1 0 0] 46.0;
    n1     n1  [0 0 0 0 0 0 0] 0;
    n2     n2  [0 0 0 0 0 0 0] 0;
    n3     n3  [0 0 0 0 0 0 0] 0;
}
ash.particles
{
    n      n  [0 0 0 0 0 0 0] 0.1;//0.0153603781016148;
    MM     MM [1 0 0 0 -1 0 0] 12.0;
    n1     n1  [0 0 0 0 0 0 0] 0;
    n2     n2  [0 0 0 0 0 0 0] 0;
    n3     n3  [0 0 0 0 0 0 0] 0;
}
carvao.particles
{
    n      n  [0 0 0 0 0 0 0] 0.3;
    MM     MM [1 0 0 0 -1 0 0] 12.0;
    n1     n1  [0 0 0 0 0 0 0] -1.0;
    n2     n2  [0 0 0 0 0 0 0] -1.0;
    n3     n3  [0 0 0 0 0 0 0] -1.0;
}

/*water.particles
{

```

```

n      n      [0 0 0 0 0 0 0] 0;
MM     MM     [1 0 0 0 -1 0 0] 18;
n1     n1     [0 0 0 0 0 0 0] 0;
n2     n2     [0 0 0 0 0 0 0] 0;
n3     n3     [0 0 0 0 0 0 0] 0;
}*/

C // ÚTIL APENAS QUANDO ENTRAR AS REAÇÕES COM CARBONO (n1 E n2)
//esse carbono serve apenas para pegar sua propriedade para o solver. não
está sendo considerado como uma fase. tem-se apenas a fase carvao.particles.
{
n      n      [0 0 0 0 0 0 0] 0.0;
MM     MM     [1 0 0 0 -1 0 0] 12.0;
n1     n1     [0 0 0 0 0 0 0] 0;
n2     n2     [0 0 0 0 0 0 0] 0;
n3     n3     [0 0 0 0 0 0 0] 0;
}

// ***** //

```

6.8. fvSchemes

```

/*-----*- C++ -*-----*\
=====
\\      /   F ield      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
\\      /   O peration  | Website:  https://openfoam.org
\\      /   A nd        | Version:  8
\\      /   M anipulation |
\*-----*/
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "system";
    object       fvSchemes;
}
// ***** //

ddtSchemes
{
    default      Euler;
}

gradSchemes
{
    default      Gauss linear;
}

divSchemes
{
    default      none;

    "div\ (phi,alpha.*\ )"      Gauss vanLeer;
    "div\ (phir,alpha.*\ )"     Gauss vanLeer;

    "div\ (alphaRhoPhi.*\ )"    Gauss limitedLinearV 1;
    "div\ (phi.*\,U.*\ )"      Gauss limitedLinearV 1;
}

```

```

        "div\ (alphaRhoPhi.*,Yi\)"          Gauss limitedLinear 1;
        "div\ (alphaRhoPhi.*, (h|e).*\)"     Gauss limitedLinear 1;
        "div\ (alphaRhoPhi.*,K.*\)"          Gauss limitedLinear 1;
        "div\ (alphaPhi.*,p\)"               Gauss limitedLinear 1;

        "div(alphaRhoPhi.particles,Theta.particles)" Gauss limitedLinear 1;
        "div(alphaRhoPhi.particles, (p|thermo:rho.particles))" Gauss limitedLinear
1;

"div(alphaRhoPhi.air, (p|thermo:rho.air))" Gauss limitedLinear 1;
"div(alphaRhoPhi.areia, (p|thermo:rho.areia))" Gauss limitedLinear 1;

"div\ (alphaRhoPhi.*, (k|epsilon).*\)"      Gauss limitedLinear 1;
"div(alphaRhoPhi.areia,Theta.areia)" Gauss limitedLinear 1;
"div(((alpha.air*thermo:rho.air)*nuEff.air)*dev2(T(grad(U.air))))" Gauss
linear;
"div(((thermo:rho.areia*nut.areia)*dev2(T(grad(U.areia))))+(((thermo:rho.areia
*lambda.areia)*div(phi.areia))*I))" Gauss linear;

"div(((thermo:rho.particles*nut.particles)*dev2(T(grad(U.particles))))+(((ther
mo:rho.particles*lambda.particles)*div(phi.particles))*I))" Gauss linear;

        "divDevTau(U.particles)"              Gauss linear;
        "divDevTau(U.areia)"                  Gauss linear;
    }

laplacianSchemes
{
    default      Gauss linear uncorrected;
    bounded      Gauss linear uncorrected;
}

interpolationSchemes
{
    default      linear;
}

snGradSchemes
{
    default      uncorrected;
    bounded      uncorrected;
}

wallDist
{
    method      meshWave;
}

// *****

```

6.9. blockMeshDict

```

/*-----*- C++ -*-----*/
=====
\\      /   F ield      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
\\      /   O peration  | Website:  https://openfoam.org

```

```

\\  /   A nd      | Version:  10
\\  /   M anipulation |

\*-----*/
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    object       blockMeshDict;
}
// * * * * *

convertToMeters 1.0;

radius      0.73; // raio do reator // D = 1.46 m
radiusNeg   -0.73;
box         0.125; // raio do downdraft tube // D = 0.25
boxNeg      -0.125;
zMax        9.5; // altura do reator cilindrica // H = 9.5
zMin        0;

nR          13; //19; //18; //12; //15; //7; // 1/4 do número de divisões na direção
circunferencial (ORIGINAL 13)
nZ          90; // #calc "$nR*6"; //50; //24; // número de divisões em z (ORIGINAL
90)
//nZ        #calc "$nR*7";

verbose no;

geometry
{
    cylinder
    {
        type      searchableCylinder;
        point1     (0 0 -100);
        point2     (0 0 100);
        radius     $radius;
    }

    cylinder2
    {
        type      searchableCylinder;
        point1     (0 0 -100);
        point2     (0 0 100);
        radius     $box;
    }
}

scale 1;

vertices
(
    // Inner
    project (0 $boxNeg $zMin) (cylinder2)
    project ($box 0 $zMin) (cylinder2)
    project ($boxNeg 0 $zMin) (cylinder2)
    project (0 $box $zMin) (cylinder2)

    /*project ($boxNeg $boxNeg $zMin) (cylinder2)
    project ($box $boxNeg $zMin) (cylinder2)
    project ($boxNeg $box $zMin) (cylinder2)

```

```

project ($box      $box      $zMin) (cylinder2)*/

// Outer block points
project (0 $radiusNeg $zMin) (cylinder)
project ($radius      0 $zMin) (cylinder)
project ($radiusNeg 0      $zMin) (cylinder)
project (0      $radius      $zMin) (cylinder)

// Inner
project (0 $boxNeg $zMax) (cylinder2)
project ($box      0 $zMax) (cylinder2)
project ($boxNeg 0      $zMax) (cylinder2)
project (0      $box      $zMax) (cylinder2)

// Outer block points
project (0 $radiusNeg $zMax) (cylinder)
project ($radius      0 $zMax) (cylinder)
project ($radiusNeg 0      $zMax) (cylinder)
project (0      $radius      $zMax) (cylinder)
);

blocks
(
  hex ( 4 5 1 0 12 13 9 8) ($nR $nR $nZ) simpleGrading (1 1 1)
  hex ( 4 0 2 6 12 8 10 14) ($nR $nR $nZ) simpleGrading (1 1 1)
  //hex ( 1 5 7 3 9 13 15 11) ($nR $nR $nZ) simpleGrading (1 1 1)
  //hex ( 2 3 7 6 10 11 15 14) ($nR $nR $nZ) simpleGrading (1 1 1)
);

edges
(
  project 4 5 (cylinder)
  //project 7 5 (cylinder)
  //project 6 7 (cylinder)
  project 4 6 (cylinder)
  project 12 13 (cylinder)
  //project 13 15 (cylinder)
  project 12 14 (cylinder)
  //project 14 15 (cylinder)

  project 0 1 (cylinder2)
  //project 3 1 (cylinder2)
  //project 2 3 (cylinder2)
  project 0 2 (cylinder2)
  project 8 9 (cylinder2)
  //project 9 11 (cylinder2)
  project 8 10 (cylinder2)
  //project 10 11 (cylinder2)
);

boundary
(
  inlet
  {
    type patch;
    faces
    (
      (0 4 5 1)
      (4 0 2 6)
      //(6 2 3 7)
      //(1 5 7 3)
    )
  }
)

```

```

    );
}

outlet
{
    type patch;
    faces
    (
        (8 9 13 12)
        (12 14 10 8)
        //(9 11 15 13)
        //(14 15 11 10)
    );
}

walls
{
    type wall;
    faces
    (
        (4 12 13 5)
        //(5 13 15 7)
        //(7 15 14 6)
        (4 6 14 12)
        //(1 3 11 9)
        //(3 2 10 11)
        (2 0 8 10)
        (1 9 8 0)
    );
}

symmetry
{
    type symmetry;
    faces
    (
        (5 13 9 1)
        (2 10 14 6)
    );
}
);

// *****

```

6.10. controlDict

```

/*-----*- C++ -*-----*\
=====
\\      /  F i e l d      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
\\      /  O p e r a t i o n | Website:  https://openfoam.org
\\      /  A n d             | Version:   8
\\//      M a n i p u l a t i o n |
\*-----*-
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;

```

```

    location      "system";
    object        controlDict;
}
// * * * * *

application      multiphaseEulerFoamReator;

startFrom        latestTime;

startTime        0;

stopAt           endTime;

endTime          5;//2.5;//20;//45;

deltaT           1e-4;//5e-5;//1e-4;//3e-4;// 2.5e-4;//1e-4;//3.75e-4;//1e-4;//5e-5;//1e-5;//5e-4;

writeControl     adjustableRunTime;

writeInterval    0.5;

purgeWrite       0;

writeFormat      binary;

writePrecision   10;

writeCompression off;

timeFormat       general;

timePrecision    6;

runTimeModifiable on;

adjustTimeStep   no;

maxCo            0.01;//1.5;

maxDeltaT        2.5e-4;

functions
{
    alphaMax      // alpha Max
    {
        type      volFieldValue;
        libs      ( "libfieldFunctionObjects.so" );
        writeControl    timeStep;
        //writeInterval  0.005;//0.0001;
        log             true;
        writeFields     false;
        regionType      all;
        //name           zona_reativa;
        operation        max;
        fields           (
            alpha.areas
            alpha.particles
        );
    }
}

```

```

courant
{
    type                CourantNo;
    libs                ("libfieldFunctionObjects.so" );
    //executeControl     timeStep;
    //executeInterval    0; //2;
    //writeFields        true;
    writeControl        writeTime; //timeStep;
}

alphaVolIntParticles // volume total PARTICLES
{
    type                surfaceFieldValue;
    libs                ( "libfieldFunctionObjects.so" );
    writeControl        timeStep;
    //writeInterval     0.005;//0.0001;
    log                 true;
    writeFields         false;
    //surfaceFormat     foam;
    regionType          patch;
    name                outlet;
    operation            sum; // OF10
    //operation
weightedSum;//weightedAreaIntegrate;//areaIntegrate;// weightedSum; //
areaIntegrate;
    weightField         alpha.air;
                        // phi - Return the volumetric flux
                        // alphaPhi - Return the volumetric flux of the phase
                        // alphaRhoPhi - Return the mass flux of the phase
    fields
    (
        H2O.air
        CO2.air
        CO.air
        H2.air
        O2.air
        N2.air
        CH4.air
        C2H4.air
        C2H6.air
        C3H8.air
    );
}

alphaVolIntegration // integração de alpha no volume
{
    type                volFieldValue;
    libs                ( "libfieldFunctionObjects.so" );
    writeControl        timeStep;
    //writeInterval     0.005;//0.0001;
    log                 true;
    writeFields         false;
    regionType          all;
    //name              zona_reativa;
    operation            volIntegrate;
    fields
    (
        alpha.particles
        bio.particles
        carvao.particles

```

```

        ash.particles
        //H2O.particles
        alpha.air
        H2O.air
        CO2.air
        CO.air
        H2.air
        O2.air
        CH4.air
        N2.air
        C2H4.air
        C2H6.air
        C3H8.air
    );
}

/*alphaVolIntParticles // volume total PARTICLES
{
    type          coded;
    libs           ("libutilityFunctionObjects.so");

    codeExecute
    #{
        const volScalarField& alphaParticles =
            mesh().lookupObject<volScalarField>("alpha.particles");
        const volScalarField& alphaAir =
            mesh().lookupObject<volScalarField>("alpha.air");

        const volScalarField& bioParticles =
            mesh().lookupObject<volScalarField>("bio.particles");
        const volScalarField& carvaoParticles =
            mesh().lookupObject<volScalarField>("carvao.particles");

        const volScalarField& H2O =
            mesh().lookupObject<volScalarField>("H2O.air");
        const volScalarField& CO2 =
            mesh().lookupObject<volScalarField>("CO2.air");
        const volScalarField& CO =
            mesh().lookupObject<volScalarField>("CO.air");
        const volScalarField& H2 =
            mesh().lookupObject<volScalarField>("H2.air");
        const volScalarField& O2 =
            mesh().lookupObject<volScalarField>("O2.air");
        const volScalarField& CH4 =
            mesh().lookupObject<volScalarField>("CH4.air");
        const volScalarField& N2 =
            mesh().lookupObject<volScalarField>("N2.air");

        // MULTIPLICAR PELO RHO CASO QUEIRA CALCULAR A MASSA TOTAL
        /* const volScalarField& rhoGas =
            mesh().lookupObject<volScalarField>("thermo:rho.gas");*/

        /* const scalarField& v = mesh().V();

        Info<< "coded alphaVolIntParticles output:" << endl
            << "    volIntegrate(all) for alpha.particles*bio.particles = "
            << gSum(alphaParticles*bioParticles*v) << endl
            << "    volIntegrate(all) for alpha.particles*carvao.particles = "
            << gSum(alphaParticles*carvaoParticles*v) << endl
            << endl;

```

```

Info<< "coded alphaVolIntGas output:" << endl
  << "    volIntegrate(all) for alpha.air*H2O.particles = "
  << gSum(alphaAir*H2O*v) << endl
  << "    volIntegrate(all) for alpha.air*CO2.particles = "
  << gSum(alphaAir*CO2*v) << endl
  << "    volIntegrate(all) for alpha.air*CO.particles = "
  << gSum(alphaAir*CO*v) << endl
  << "    volIntegrate(all) for alpha.air*H2.particles = "
  << gSum(alphaAir*H2*v) << endl
  << "    volIntegrate(all) for alpha.air*O2.particles = "
  << gSum(alphaAir*O2*v) << endl
  << "    volIntegrate(all) for alpha.air*CH4.particles = "
  << gSum(alphaAir*CH4*v) << endl
  << "    volIntegrate(all) for alpha.air*N2.particles = "
  << gSum(alphaAir*N2*v) << endl
  << endl;

#};*/

/*  inletParticleFlux
{
    type            surfaceFieldValue;
    libs            ( "libfieldFunctionObjects.so" );
    writeControl     timeStep;
    //writeInterval  0.005;//0.0001;
    log             true;
    writeFields      false;
    //surfaceFormat  foam;
    regionType       patch;
    name            inlet;
    operation        weightedSum;//weightedAreaIntegrate;//areaIntegrate;//
weightedSum; // areaIntegrate;
    weightField      phi.particles;//alpha.air;
    fields
        (
            alpha.particles
            bio.particles
            carvao.particles
            ///ash.particles
        );
}*/

InletMassFlowRate
{
    type            surfaceFieldValue;
    libs            ("libfieldFunctionObjects.so");
    log             true;
    writeControl     timeStep;
    writeFields      false;
    regionType       patch;
    name            inlet;
    operation        sum; // weightedAreaIntegrate;
    fields          ( alphaRhoPhi.air alphaRhoPhi.particles alphaRhoPhi.area );
    //weightField    alpha.air;
}

InletVolFlowRate
{
    type            surfaceFieldValue;
    libs            ("libfieldFunctionObjects.so");

```

```

log            true;
writeControl   timeStep;
writeFields    false;
regionType     patch;
name           inlet;
operation      weightedAverage;//sum;//weightedAreaIntegrate;
fields
(
// phi - Return the volumetric flux
// alphaPhi - Return the volumetric flux of the phase
// alphaRhoPhi - Return the mass flux of the phase

    alphaPhi.air//phi.air
    alphaPhi.particles
    alphaPhi.area
);
//weightField    alpha.air;
}

inletMassFluxComposition
{
    type            surfaceFieldValue;
    libs            ( "libfieldFunctionObjects.so" );
    writeControl     timeStep;
    //writeInterval  0.005;//0.0001;
    log             true;
    writeFields      false;
    //surfaceFormat  foam;
    regionType       patch;
    name            inlet;
    operation        weightedAverage; // OF10
    //operation      weightedSum;

    // phi - Return the volumetric flux
    // alphaPhi - Return the volumetric flux of the phase
    // alphaRhoPhi - Return the mass flux of the phase
    weightField      alphaRhoPhi.air;
    fields
    (
        H2O.air
        CO2.air
        CO.air
        H2.air
        O2.air
        N2.air
        CH4.air
        C2H4.air
        C2H6.air
        C3H8.air
    );
}

inletVolFluxComposition // fluxo volumétrico
{
    type            surfaceFieldValue;
    libs            ( "libfieldFunctionObjects.so" );
    writeControl     timeStep;
    //writeInterval  0.005;//0.0001;
    log             true;
    writeFields      false;
    //surfaceFormat  foam;

```

```

        regionType      patch;
        name            inlet;
        operation        weightedAverage; //sum; // OF10
        //operation
weightedSum;//weightedAreaIntegrate;//areaIntegrate;// weightedSum; //
areaIntegrate;
    weightField        alphaPhi.air;
                        // phi - Return the volumetric flux
                        // alphaPhi - Return the volumetric flux of the phase
                        // alphaRhoPhi - Return the mass flux of the phase
    fields
    (
        H2O.air
        CO2.air
        CO.air
        H2.air
        O2.air
        N2.air
        CH4.air
        C2H4.air
        C2H6.air
        C3H8.air
    );
}

outletMassFluxComposition // fluxo mássico
{
    type                surfaceFieldValue;
    libs                ( "libfieldFunctionObjects.so" );
    writeControl        timeStep;
    //writeInterval      0.005;//0.0001;
    log                 true;
    writeFields         false;
    //surfaceFormat      foam;
    regionType          patch;
    name                outlet;
    operation            weightedAverage; //sum; // OF10
    //operation
weightedSum;//weightedAreaIntegrate;//areaIntegrate;// weightedSum; //
areaIntegrate;
    weightField        alphaRhoPhi.air;
                        // phi - Return the volumetric flux
                        // alphaPhi - Return the volumetric flux of the phase
                        // alphaRhoPhi - Return the mass flux of the phase
    fields
    (
        H2O.air
        CO2.air
        CO.air
        H2.air
        O2.air
        N2.air
        CH4.air
        C2H4.air
        C2H6.air
        C3H8.air
    );
}

outletVolFluxComposition // fluxo volumétrico
{

```

```

        type            surfaceFieldValue;
        libs            ( "libfieldFunctionObjects.so" );
        writeControl    timeStep;
        //writeInterval  0.005;//0.0001;
        log             true;
        writeFields     false;
    //surfaceFormat    foam;
        regionType      patch;
        name            outlet;
        operation        weightedAverage; //sum; // OF10
        //operation
weightedSum;//weightedAreaIntegrate;//areaIntegrate;// weightedSum; //
areaIntegrate;
        weightField      alphaPhi.air;
                        // phi - Return the volumetric flux
                        // alphaPhi - Return the volumetric flux of the phase
                        // alphaRhoPhi - Return the mass flux of the phase
        fields
        (
            H2O.air
            CO2.air
            CO.air
            H2.air
            O2.air
            N2.air
            CH4.air
            C2H4.air
            C2H6.air
            C3H8.air
        );
    }

outletAlphas // para cálculo da CCE
{
    type            surfaceFieldValue;
    libs            ( "libfieldFunctionObjects.so" );
    writeControl    timeStep;
    //writeInterval  0.005;//0.0001;
    log             true;
    writeFields     false;
    //surfaceFormat  foam;
    regionType      patch;
    name            outlet;
    operation        average; //sum; // OF10
    //operation
weightedSum;//weightedAreaIntegrate;//areaIntegrate;// weightedSum; //
areaIntegrate;
        //weightField      alphaPhi.air;
                        // phi - Return the volumetric flux
                        // alphaPhi - Return the volumetric flux of the phase
                        // alphaRhoPhi - Return the mass flux of the phase
        fields
        (
            CO2.air
            CO.air
            CH4.air
            C2H4.air
            C2H6.air
            C3H8.air
            alpha.air
        );
};

```

```

    }

/*    inletParticleFlux
    {
        type            surfaceFieldValue;
        libs            ( "libfieldFunctionObjects.so" );
        writeControl     timeStep;
        //writeInterval  0.005;//0.0001;
        log              true;
        writeFields      false;
        //surfaceFormat  foam;
        regionType       patch;
        name             inlet;
        operation        weightedSum;//weightedAreaIntegrate;//areaIntegrate;//
weightedSum; // areaIntegrate;
        weightField      phi.particles;//alpha.air;
        fields
            (
                alpha.particles
                bio.particles
                carvao.particles
                //ash.particles

            );
    }*/

/*    outletParticleFlux
    {
        type            surfaceFieldValue;
        libs            ( "libfieldFunctionObjects.so" );
        writeControl     timeStep;
        //writeInterval  0.005;//0.0001;
        log              true;
        writeFields      false;
        //surfaceFormat  foam;
        regionType       patch;
        name             outlet;
        operation        weightedSum;//weightedAreaIntegrate;//areaIntegrate;//
weightedSum; // areaIntegrate;
        weightField      phi.particles;//alpha.air;
        fields
            (
                alpha.particles
                bio.particles
                carvao.particles
                //ash.particles

            );
    }*/

inletPressure
{
    type            surfaceFieldValue;
    libs            ( "libfieldFunctionObjects.so" );
    writeControl     runTime;
    writeInterval    0.005;//0.0001;
    log              true;
    writeFields      false;
    regionType       patch;
    name             inlet;
    operation        average;

```

```

        fields          ( p );
    }

volumeAreia
{
    type                volFieldValue;
    libs                ( "libfieldFunctionObjects.so" );
    writeControl        runTime;
    writeInterval       0.005;//0.0001;
    log                 true;
    writeFields         false;
    regionType          all;
    operation           volIntegrate;
    fields              ( alpha.areia );
}

volumeParticles
{
    type                volFieldValue;
    libs                ( "libfieldFunctionObjects.so" );
    writeControl        runTime;
    writeInterval       0.005;//0.0001;
    log                 true;
    writeFields         false;
    regionType          all;
    operation           volIntegrate;
    fields              ( alpha.particles );
}

/*sumAreia
{
    type                volFieldValue;
    libs                ( "libfieldFunctionObjects.so" );
    writeControl        runTime;
    writeInterval       0.005;//0.0001;
    log                 true;
    writeFields         false;
    regionType          all;
    operation           sum;
    fields              ( alpha.areia );
}*/

volume_air
{
    type                volFieldValue;
    libs                ( "libfieldFunctionObjects.so" );
    writeControl        runTime;
    writeInterval       0.005;//0.0001;
    log                 true;
    writeFields         false;
    regionType          all;
    operation           volIntegrate;
    fields              ( alpha.air);
}

volume_bio
{
    type                volFieldValue;
    libs                ( "libfieldFunctionObjects.so" );
    writeControl        runTime;
    writeInterval       0.005;//0.0001;

```

```

        log            true;
        writeFields    false;
        regionType     all;
        operation      sum; // OF10
        //operation     weightedVolIntegrate;
    weightField alpha.particles;
        fields         ( bio.particles );
    }

sum_bio
{
    type              volFieldValue;
    libs              ( "libfieldFunctionObjects.so" );
    writeControl      runTime;
    writeInterval     0.005;//0.0001;
    log               true;
    writeFields       false;
    regionType        all;
    operation          sum; // OF10
    //operation        weightedSum;
    weightField alpha.particles;
        fields         ( bio.particles );
    }

volume_char
{
    type              volFieldValue;
    libs              ( "libfieldFunctionObjects.so" );
    writeControl      runTime;
    writeInterval     0.005;//0.0001;
    log               true;
    writeFields       false;
    regionType        all;
    operation          sum; // OF10
    //operation        weightedVolIntegrate;
    weightField alpha.particles;
        fields         ( carvao.particles );
    }

/* volume_ash
{
    type              volFieldValue;
    libs              ( "libfieldFunctionObjects.so" );
    writeControl      runTime;
    writeInterval     0.005;//0.0001;
    log               true;
    writeFields       false;
    regionType        all;
    operation          weightedVolIntegrate;
    weightField alpha.particles;
        fields         ( ash.particles );
}*/

voidage
{
    type              volFieldValue;
    libs              ( "libfieldFunctionObjects.so" );
    writeControl      runTime;
    writeInterval     0.005;//0.0001;
    log               true;
    writeFields       false;

```

```

        regionType      cellZone;
        name             zona_reativa;
        operation        average;
        fields            ( alpha.air );
    }

    superficialVelocity
    {
        type             surfaceFieldValue;
        libs              ( "libfieldFunctionObjects.so" );
        writeControl      timeStep;
        //writeInterval    0.005;//0.0001;
        log               true;
        writeFields        false;
        regionType        patch;
        name              inlet;
        operation          average;
        fields             ( U.air );
    }

    alphaInlet
    {
        type             surfaceFieldValue;
        libs              ( "libfieldFunctionObjects.so" );
        writeControl      timeStep;//runTime;
        //writeInterval    writeTime; //0.00000001;//0.0001;
        log               true;
        writeFields        false;
        regionType        patch;
        name              inlet;
        operation          average;
        fields             ( alpha.particles
                           alpha.air
                           alpha.areia );
    }

    averageTx
    {
        type             volFieldValue;
        libs              ( "libfieldFunctionObjects.so" );
        writeControl      timeStep;
        //writeInterval    0.005;//0.0001;
        log               true;
        writeFields        false;
        regionType        all;
        //operation        average;
        operation          weightedAverage;
        weightField        alpha.particles;
        fields             ( tx );
    }

    averageRhoy_bio_tx
    {
        type             volFieldValue;
        libs              ( "libfieldFunctionObjects.so" );
        writeControl      timeStep;
        //writeInterval    0.005;//0.0001;
        log               true;
        writeFields        false;
        regionType        all;
        //operation        average;

```

```

        operation      weightedAverage;
        weightField    alpha.particles;
        fields          ( rhoY_bio_tx
                        rhoY_bio);
    }

averageTx1
{
    type              volFieldValue;
    libs              ( "libfieldFunctionObjects.so" );
    writeControl       timeStep;
    //writeInterval    0.005;//0.0001;
    log                true;
    writeFields        false;
    regionType         all;
    //operation         average;
    operation          weightedAverage;
    weightField        alpha.particles;
    fields             ( tx1 );
}

averageRhoY_char_tx1
{
    type              volFieldValue;
    libs              ( "libfieldFunctionObjects.so" );
    writeControl       timeStep;
    //writeInterval    0.005;//0.0001;
    log                true;
    writeFields        false;
    regionType         all;
    //operation         average;
    operation          weightedAverage;
    weightField        alpha.particles;
    fields             ( rhoY_char_tx1
                        rhoY_char );
}

averageTx2
{
    type              volFieldValue;
    libs              ( "libfieldFunctionObjects.so" );
    writeControl       timeStep;
    //writeInterval    0.005;//0.0001;
    log                true;
    writeFields        false;
    regionType         all;
    //operation         average;
    operation          weightedAverage;
    weightField        alpha.particles;
    fields             ( tx2 );
}

averageRhoY_char_tx2
{
    type              volFieldValue;
    libs              ( "libfieldFunctionObjects.so" );
    writeControl       timeStep;
    //writeInterval    0.005;//0.0001;
    log                true;
    writeFields        false;
    regionType         all;

```

```

        //operation      average;
        operation        weightedAverage;
        weightField      alpha.particles;
        fields            ( rhoY_char_tx2
                           rhoY_char );
    }

    averageTx3
    {
        type              volFieldValue;
        libs              ( "libfieldFunctionObjects.so" );
        writeControl      timeStep;
        //writeInterval    0.005;//0.0001;
        log               true;
        writeFields       false;
        regionType        all;
        //operation        average;
        operation          weightedAverage;
        weightField       alpha.particles;
        fields            ( tx3 );
    }

    averageRhoY_char_tx3
    {
        type              volFieldValue;
        libs              ( "libfieldFunctionObjects.so" );
        writeControl      timeStep;
        //writeInterval    0.005;//0.0001;
        log               true;
        writeFields       false;
        regionType        all;
        //operation        average;
        operation          weightedAverage;
        weightField       alpha.particles;
        fields            ( rhoY_char_tx3
                           rhoY_char );
    }

    averageTemperaturePart
    {
        type              volFieldValue;
        libs              ( "libfieldFunctionObjects.so" );
        writeControl      timeStep;
        //writeInterval    0.005;//0.0001;
        log               true;
        writeFields       false;
        regionType        all;//cellZone;//all;
        //name             zona_reativa;
        operation          weightedAverage;
        weightField       alpha.particles;
        fields            ( T.particles );
    }

    averageTemperatureAreia
    {
        type              volFieldValue;
        libs              ( "libfieldFunctionObjects.so" );
        writeControl      timeStep;
        //writeInterval    0.005;//0.0001;
        log               true;
        writeFields       false;

```

```

        regionType      all;//cellZone;//all;
        //name          zona_reativa;
        operation        weightedAverage;
        weightField      alpha.areia;
        fields           ( T.areia );
    }

    averageTemperatureAir
    {
        type              volFieldValue;
        libs              ( "libfieldFunctionObjects.so" );
        writeControl      timeStep;
        //writeInterval    0.005;//0.0001;
        log               true;
        writeFields       false;
        regionType        all;//cellZone;//all;
        //name            zona_reativa;
        operation          weightedAverage;
        weightField        alpha.air;
        fields            ( T.air );
    }
} // fim functions

```

6.11. singleGraph

```

/*-----*- C++ -*-----*\
=====
\\      /  F ield          | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
\\      /  O peration      | Website:  https://openfoam.org
\\      /  A nd            | Version:  7
\\//     M anipulation    |
-----
Description
    Writes graph data for specified fields along a line, specified by start
    and end points.

/*-----*-
start    (0 -0.365 0); // não pegar 0 0 0 pois no meio eh vazio (downdraft tube)
end      (0 -0.365 9.5);
fields   (p T.air T.particles T.areia);

// Sampling and I/O settings
#includeEtc "caseDicts/postProcessing/graphs/sampleDict.cfg"

// Override settings here, e.g.

/*setConfig
{
    //type lineCell;
    //axis z;          // y, z, xyz
    //nPoints 100;
}*/

// Must be last entry
#includeEtc "caseDicts/postProcessing/graphs/graph.cfg"

```

```
// ***** //
```

6.12. topoSetDict

```
/*----- C++ -----*\
| =====|
| \ \ / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox|
| \ \ / O p e r a t i o n | Version: 2.1.0|
| \ \ / A n d | Web: www.OpenFOAM.org|
| \ \ / M a n i p u l a t i o n |
\*-----*/
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    object       topoSetDict;
}

// ***** //
actions
(
    {
        name      zona_reativa; // definição da zona reativa (correspondente a
aproximadamente igual ao leito), contando que o termo fonte de massa vai atuar
apenas nessa região
        type      cellSet;
        action     new;
        source     cylinderToCell;
        sourceInfo
        {
            p1 (0 0 0); // ponto inferior
            p2 (0 0 4); // ponto superior
            radius 10.0; // raio do cilindro do domínio da zona reativa
        }
    }

    //Definição da zona_reativa mas como uma cellZone
    {
        name      zona_reativa;
        type      cellZoneSet;
        action     new;
        source     cylinderToCell;
        sourceInfo
        {
            p1 (0 0 0);
            p2 (0 0 4);
            radius 10.0;
        }
    }
);

// ***** //
```

6.13. setfields

```

/*-----*- C++ -*-----*/
| ===== |
| \ \      / F ield      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
| \ \      / O peration  | Version: v1906 |
| \ \      / A nd        | Web: www.OpenFOAM.com |
| \ \      / M anipulation |
|-----*/
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "system";
    object       setFieldsDict;
}
// * * * * *

defaultFieldValues
(
    volScalarFieldValue alpha.air 1
    volScalarFieldValue alpha.particles 0
    volScalarFieldValue alpha.areia 0
);

regions
(
    boxToCell
    {
        box (-10 -10 0) (10 10 10); // altura do leito calculada para massa de
areia igual a 2487,481 kg (relativa a 3,25 m de altura)
        fieldValues
        (
            volScalarFieldValue T.particles 1000 // 727 °C
        );
    }

    boxToCell
    {
        box (-10 -10 0) (10 10 3.25); // altura do leito calculada para massa
de areia igual a 2487,481 kg (relativa a 3,25 m de altura)
        fieldValues
        (
            volScalarFieldValue alpha.air 0.45
            volScalarFieldValue alpha.particles 0.15
            volScalarFieldValue alpha.areia 0.4
        );
    }
);

// * * * * *

```

6.14. *decomposeParDict*

```

/*-----*- C++ -*-----*\
=====
\\      /  F ield      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
\\      /  O peration  | Website:  https://openfoam.org
\\      /  A nd        | Version:  8
\\      /  M anipulation |
/*-----*- C++ -*-----*\
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    object       decomposeParDict;
}
// *****

numberOfSubdomains 20;//12;//4;

/*
    Main methods are:
    1) Geometric: "simple"; "hierarchical", with ordered sorting, e.g. xyz, yxz
    2) Scotch: "scotch", when running in serial; "ptscotch", running in
parallel
*/

method                simple;

simpleCoeffs
{
    n                  (1 4 5);//(1 3 4); //(1 4 1); // total must match
numberOfSubdomains
    delta              0.001;
}

hierarchicalCoeffs
{
    n                  (2 2 1); //(1 4 1); // total must match numberOfSubdomains
    delta              0.001;
    order              xyz;
}

// *****

```

6.15. *fvSolutions*

```

/*-----*- C++ -*-----*\
=====
\\      /  F ield      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
\\      /  O peration  | Website:  https://openfoam.org
\\      /  A nd        | Version:  8
\\      /  M anipulation |
/*-----*- C++ -*-----*\
FoamFile

```

```

{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "system";
    object       fvSolution;
}
// * * * * *

solvers
{
    "alpha.*"
    {
        nAlphaCorr      1;
        nAlphaSubCycles 3;
        implicitPhasePressure yes;

        extremaCoeff    1;

        solver           PBiCGStab;
        preconditioner   DIC;

        tolerance        1e-9;
        relTol            0;
        minIter           1;
    }

    p_rgh
    {
        solver           GAMG;
        smoother         DIC;
        tolerance        1e-8;
        relTol            0.01;
    }

    p_rghFinal
    {
        $p_rgh;
        relTol            0;
    }

    "U.*"
    {
        solver           smoothSolver;
        smoother         symGaussSeidel;
        tolerance        1e-5;
        relTol            0;
        minIter           1;
    }

    "(h|e).*"
    {
        solver           smoothSolver;
        smoother         symGaussSeidel;
        tolerance        1e-6;
        relTol            0.1;//0;
        minIter           1;
        maxIter           10;
    }

    "Theta.*"

```

```

{
    solver          PBiCGStab;
    preconditioner   DILU;
    tolerance        1e-6;
    relTol           0;
    minIter          1;
}

"(k|epsilon).*"
{
    solver          PBiCGStab;
    preconditioner   DILU;
    tolerance        1e-5;
    relTol           0;
    minIter          1;
}
"Yi.*"
{
    /* solver          smoothSolver;
    smoother         symGaussSeidel;
    tolerance         1e-12;
    relTol            0;
    minIter           1;
    residualAlpha     1e-8;*/

    /*maxIter         2;
    solver             GAMG;
    smoother           symGaussSeidel;
    tolerance           1e-10;
    relTol              0.0;
    residualAlpha       1e-8;*/

    solver            PBiCG;
    preconditioner     DILU;
    tolerance          1e-8;
    relTol             0.1;
    residualAlpha      1e-8;
}
}

PIMPLE
{
    /*nOuterCorrectors 3;
    nCorrectors         2;
    nNonOrthogonalCorrectors 2;//1;//0; 22.28
    faceMomentum        no;*/

    nOuterCorrectors 3;
    nCorrectors         2;
    nNonOrthogonalCorrectors 0;
    faceMomentum        no;

    /*momentumPredictor  yes;
    nOuterCorrectors     1;
    nCorrectors           2;
    nNonOrthogonalCorrectors 0;
    maxDeltaT             1e-4;
    maxCo                 0.25;
    alphaTemp             0.05;
    alphaY                0.05;

```

```

Yref
{
    O2          0.1;
    CH4         0.1;
}
rDeltaTSmoothingCoeff 0.05;
rDeltaTDampingCoeff   1;*/
}

relaxationFactors
{
    equations
    {
        "."      0.99;//1.0001;//1;
    }
    /*fields
    {
        "p_rgh." 0.7;
    }
    equations
    {
        "U."      0.5;
        "(h|e)."  0.3;
        "(k;epsilon)." 0.2;
    }*/
}

// ***** //

```