

**Universidade de Brasília - UnB
Faculdade UnB Gama - FGA
Curso de Engenharia de Energia**

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA SECAGEM DE
PARTÍCULAS DE BIOMASSA EM TEMPERATURAS
TÍPICAS DE COMBUSTÃO**

**Autor: Lucas Douglas Nóbrega Coelho
Orientador: Fábio Alfaia da Cunha**

**Gama, DF
2013**



LUCAS DOUGLAS NÓBREGA COELHO

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA SECAGEM DE PARTÍCULAS DE BIOMASSA
EM TEMPERATURAS TÍPICAS DE COMBUSTÃO**

Monografia submetida ao curso de graduação em Engenharia de Energia Universidade de Brasília, como requisito parcial para obtenção do Título de Bacharel em Engenharia de Energia.

Orientador: Prof. Dr. Fábio Alfaia da Cunha

**Gama, DF
2013**

CIP – Catalogação Internacional da Publicação*

Coelho, Lucas Douglas Nóbrega.

Modelagem e simulação da secagem de partículas sólidas de biomassa em temperaturas típicas de combustão /Lucas Douglas Nóbrega Coelho. Brasília: UnB, 2013.

Monografia (Graduação) – Universidade de Brasília
Faculdade do Gama, Brasília, 2013. Orientação: Fábio Alfaia da Cunha

1. Secagem. 2. Partículas sólidas. 3. Combustão I. Cunha, Fábio Alfaia da. II. Título.

CDU Classificação



MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA SECAGEM DE PARTÍCULAS DE BIOMASSA EM TEMPERATURAS TÍPICAS DE COMBUSTÃO

Lucas Douglas Nóbrega Coelho

Monografia submetida como requisito parcial para obtenção do Título de Bacharel em Engenharia de Energia da Faculdade UnB Gama - FGA, da Universidade de Brasília, em (02/12/2013) apresentada e aprovada pela banca examinadora abaixo assinada:

Prof. Dr. Fábio Alfaia da Cunha, UnB/ FGA
Orientador

Profa. Dra. Thais Maia Araújo, UnB/ FGA
Membro Convidado

Prof. Dr. Augusto César de M. Brasil, UnB/ FGA
Membro Convidado

Gama, DF
2013

Aos meus pais Luzia e Rafael, ao meu irmão
Rafael Jr. e á Camila.

AGRADECIMENTOS

À Deus, por ter me concedido saúde e perseverança necessárias para que eu superasse as dificuldades e seguisse em frente rumo à conquista de uma importante etapa de minha vida.

Aos meus pais, Luzia e Rafael, e meu irmão Júnior por toda confiança, força e apoio em todos os momentos da minha vida.

Ao meu professor orientador, Fabio Alfaia da Cunha pela orientação, dedicação, paciência e constante incentivo, com os quais foi possível a concretização deste trabalho.

Aos meus amigos pelo incentivo e companheirismo.

Aos professores da Faculdade UnB Gama, em especial o Dr. André Barros de Sales e a Dra. Maria Del Pilar por terem me auxiliado em projetos de pesquisa na faculdade e contribuídos de diversas formas ao decorrer de minha graduação.

À minha namorada Camila pelo amor, incentivo e compreensão.

Para quem não sabe para onde quer ir, qualquer caminho serve (Lewis Carroll)

RESUMO

Neste trabalho é apresentada a modelagem da secagem de partículas sólidas de biomassa em temperaturas típicas de combustão. Para a modelagem são consideradas equações transientes de conservação da massa, conservação de espécies químicas, conservação da energia e conservação de quantidade de movimento (para um regime de baixo número de Reynolds). A partícula é tratada como um meio poroso, sendo que a equação de conservação de energia considera o equilíbrio térmico entre as fases. As propriedades termoquímicas associadas às equações de conservação são calculadas em função da temperatura e concentração local dos gases. Os três modelos mais frequentemente utilizados para avaliar a taxa de evaporação da umidade são apresentados: modelo cinético, modelo de equilíbrio térmico e modelo convectivo. A pirólise também é considerada na modelagem, isto porque nas temperaturas associadas à combustão sempre existe sobreposição entre a secagem e a pirólise. Assim, além das espécies associadas à secagem em ar atmosférico, no caso O_2 , N_2 e H_2O , espécies associadas à pirólise também são consideradas, CO , CO_2 , H_2 , H_2O , CH_4 e C_6H_6 , devido a degradação térmica do material. Alguns resultados obtidos através das simulações são comparados com resultados experimentais e é verificada uma boa concordância para a predição da conversão de massa em função do tempo e dos perfis de temperatura para os três modelos.

Palavras-chave: Secagem, partículas sólidas, combustão, umidade, simulação numérica.

ABSTRACT

This paper presents the modeling of drying of solid biomass particles in typical combustion temperatures is presented. For modeling are considered transient equations of conservation of mass, conservation of chemical species, conservation of energy and conservation of momentum (for a regime of low Reynolds number). The particle is treated as a porous medium, and the energy conservation equation considers thermal equilibrium between the phases. The thermochemical properties associated with the conservation equations are calculated as a function of temperature and local gas concentration. The three models most frequently used to assess the rate of evaporation of moisture are presented: kinetic model, model and convective thermal equilibrium model. Pyrolysis is also considered in the modeling, this because the temperatures associated with combustion there is always overlap between drying and pyrolysis. Thus, in addition to the species associated with drying in air, where O_2 , N_2 and H_2O associated with the pyrolysis species are also considered, CO , CO_2 , H_2 , H_2O , CH_4 and C_6H_6 due to thermal degradation of the material. Some results obtained from the simulations are compared to experimental results and good agreement is verified to predict the mass conversion as a function of time and temperature profiles for the three models.

Keywords: Drying, solid particles, combustion, moisture, numerical simulation.

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1 - Fontes de Biomassa	5
Figura 3.2 - Mecanismos de difusão e convecção de umidade em material poroso.....	10
Figura 4.1 - Estrutura de fibra de madeira dura.....	14
Figura 5. 1 - Amostra de madeira isolada tirada do trabalho de Hong Lu (2006).....	32
Figura 5.2 - Domínio computacional.....	32
Figura 5.3 - Domínio computacional: vista em perspectiva.....	33
Figura 5.4 - Perfil bidimensional axissimétrico em coordenadas cilíndricas utilizado nas simulações.	33
Figura 5.5 – (a) Campo de temperatura inicial, (b) campo de velocidades inicial e (c) campo de porosidade inicial.	35
Figura 5.6 – Malha 1: Fina	37
Figura 5.7 – Malha2: Intermediária.....	37
Figura 5.8 – Malha 3: Grossa	38
Figura 5.9 – Conversão de massa: teste espacial de malha	39
Figura 5.10 - Temperatura superficial média da partícula: teste espacial de malha.....	39
Figura 5.11 – Temperatura no interior da partícula: teste espacial de malha.....	40
Figura 5.12 – Tempo de CPU gasto nas simulações do teste de sensibilidade espacial	40
Figura 5.13 - Conversão de massa teste: teste temporal de malha	42
Figura 5.14 – Temperatura superficial média da partícula: teste temporal de malha.....	42
Figura 5.15 - Temperatura no interior da partícula: teste temporal de malha	43
Figura 5.16 - Tempo de CPU gasto nas simulações do teste de sensibilidade temporal.....	43
Figura 6.1 - Comparação curvas de conversão de massa em função do tempo para o modelo cinético	47
Figura 6.2 - Comparação curvas de conversão de massa em função do tempo para o modelo de equilíbrio térmico.....	47
Figura 6.3 - Comparação curvas de conversão de massa em função do tempo para o modelo convectivo.....	48
Figura 6.4 - Umidade versus Temperatura interna – modelo cinético	49
Figura 6.5 - Degradação dos constituintes da biomassa.....	50
Figura 6.6 - Degradação unitária dos constituintes da biomassa.....	51
Figura 6.7 - Perfis de temperatura interna e superficial	52
Figura 6.8 – Curvas de temperatura em função do tempo – modelo cinético	54

Figura 6.9 - Curvas de temperatura em função do tempo – modelo de equilíbrio térmico.....	54
Figura 6.10 – Curvas de temperatura em função do tempo – modelo convectivo	55
Figura 6.11 - Variação da temperatura em relação ao tempo	57
Figura 6.12 - Campos de velocidade em diversos instantes de tempo	58
Figura 6.13 - Variação da porosidade em relação ao tempo	59
Figura 6.14 - Comparação curvas de conversão de massa em função do tempo dos modelos propostos.....	53
Figura 6.15 - Conversão de umidade em vapor.....	53
Figura 6.16 - Comparação curvas de temperatura no interior da partícula simuladas em função do tempo	54
Figura 6.17 - Comparação curvas de temperatura média na superfície da partícula em função do tempo	55
Figura 6.18 - Tempo de CPU gasto nas simulações	56

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 – Composição química de biomassa.....	6
Tabela 3.2 - Composição elementar de biomassa base seca.....	7
Tabela 3.3 - Composição imediata de biomassa base seca.....	7
Tabela 4.1- Parâmetros para o modelo de superposição	24
Tabela 4.2 - Composição dos gases voláteis provenientes da pirólise	25
Tabela 5.1 – Condições de contorno, CC, e condições iniciais, CI.....	34
Tabela 5.2 - Propriedades das malhas para teste de sensibilidade espacial.....	37
Tabela 6.1 – Propriedades da biomassa simulada	46
Tabela 6.2 – Análise elementar madeira macia	46

LISTA DE SÍMBOLOS

A	Fator de frequência (-)
A_{sup}	Área superficial (m^2)
C_F	Coeficiente de Forchheimer (-)
C_{H_2O}	Concentração de água ($kg\ m^{-3}$)
$c_{p,cinza}$	Calor específico da cinza ($J\ kg^{-1}\ K^{-1}$)
$c_{p,cs}$	Calor específico do combustível sólido seco ($J\ kg^{-1}\ K^{-1}$)
$c_{p,g}$	Calor específico mistura de gás ($J\ kg^{-1}\ K^{-1}$)
$c_{p,k}$	Calor específico molar espécie k ($J\ kg^{-1}\ K^{-1}$)
$c_{p,s}$	Calor específico do sólido ($J\ kg^{-1}\ K^{-1}$)
$c_{p,u}$	Calor específico da umidade ($J\ kg^{-1}\ K^{-1}$)
C_{ws}	Concentração de umidade na superfície da partícula ($kg\ m^{-3}$)
$C_{w\infty}$	Concentração de umidade no fluxo de gás ($kg\ m^{-3}$)
$D_{k,eff}$	Coeficiente de difusão efetivo da espécie k ($m^2\ s^{-1}$)
$D_{K,k}$	Coeficiente de difusão Knudsen ($m^2\ s^{-1}$)
$D_{m,k}$	Coeficiente de difusão na fase gasosa da espécie k ($m^2\ s^{-1}$)
d_p	Diâmetro dos poros (m)
$d_{p,Re}$	Diâmetro específico do poro (m)
E	Energia de ativação da reação ($J\ kmol^{-1}$)
$f_{mv,i}$	Fração de massa dos voláteis (-)
g_1	Parâmetro eq. (3.80)
h	Coeficiente de troca de calor entre a fase sólida e a gasosa ($W\ m^2K^{-1}$)
$H_{secagem}$	Calor latente de vaporização da água ($J\ kg^{-1}$)
Jc	Termo de correção Eq. (3.24)-(3.31)
K	Permeabilidade absoluta (Darcy ou m^2)
k_{cinza}	Condutividade térmica da cinza ($W\ m^{-1}\ K^{-1}$)
k_{cs}	Condutividade térmica do combustível sólido seco ($W\ m^{-1}\ K^{-1}$)
k_g	Condutividade térmica da mistura de gases ($W\ m^{-1}\ K^{-1}$)
k_m	Coeficiente de transferência de massa ($m\ s^{-1}$)
k_{pyr}	Parâmetro eq. (3.35)
k_{rad}	Condutividade radiativa ($W\ m^{-1}\ K^{-1}$)
k_s	Condutividade térmica do material sólido ($W\ m^{-1}\ K^{-1}$)
k_u	Condutividade térmica da umidade ($W\ m^{-1}\ K^{-1}$)
m_{cinza}	Massa de cinza (kg)
m_{coque}	Massa de coque (kg)
m_{cs}	Massa de combustível sólido seco (kg)
m_{H_2O}	Massa de água (kg)
m_{H_2Of}	Massa de água final(kg)
m_{H_2Oi}	Massa de água inicial (kg)
m_p	Massa da partícula (kg)
m_s	Massa de matéria seca (kg)
m_{ti}	Massa de inicial total (kg)
m_u	Massa de umidade (kg)
m_v	Massa de voláteis (kg)
N_{SP}	Número de espécies (-)

p	Pressão de mistura de gás (Pa) Campo de pressões (Pa)
Q_{rad}	Potência Radiativa (W)
R	Constante Universal dos Gases ($\text{kmol}^{-1}\text{K}^{-1}$)
S	Área superficial específica (m^2m^{-3})
S_T	Área superficial específica de troca de calor (m^2m^{-3})
T_g	Temperatura do gás (K)
T_{rad}	Temperatura de referência para radiação (K)
T_s	Temperatura do sólido (K)
u	Velocidade de Darcy (-)
u_c	Campo de velocidades (-)
$u_{m,k}$	Velocidade média das moléculas de uma espécie k (m s^{-1})
\bar{W}	Peso molecular (kg kmol^{-1})
W_k	Peso molecular espécie k (kg kmol^{-1})
$W_{g,j}$	Peso molecular da espécie gasosa j (kg kmol^{-1})
$W_{g,k}$	Peso molecular da espécie gasosa k (kg kmol^{-1})
W_k	Peso molecular espécie k (kg kmol^{-1})
\bar{W}_s	Peso atômico médio do sólido (kg kmol^{-1})
V	Velocidade média intrínseca (m s^{-1})
V_G	Volume de gases (m^3)
V_S	Volume de sólido (m^3)
V_S^T	Volume total de material sólido (m^3)
V_T	Volume total (m^3)
X_{cinza}	Fração de volume de cinza (-)
X_{cs}	Fração de volume de combustível seco (-)
X_k	Fração da espécie k (-)
X_u	Fração de volume de umidade (-)
Y_{bs}	Teor de umidade base seca (-)
Y_{bu}	Teor de umidade base úmida (-)
Y_i	Teor de umidade inicial (-)
Y_f	Teor de umidade final (-)
Y_k	Fração de massa espécie k (-)

Símbolos Gregos

ΔH_{evap}	Entalpia de evaporação da biomassa (kJ kg^{-1})
ε	Porosidade (-)
ε_{rad}	Emissividade Radiativa (-)
μ	Viscosidade dinâmica ($\text{kgm}^{-1}\text{s}^{-1}$)
μ_g	Viscosidade dinâmica da mistura de gases ($\text{kgm}^{-1}\text{s}^{-1}$)
μ_j	Viscosidade dinâmica do componente puro j ($\text{kgm}^{-1}\text{s}^{-1}$)
μ_k	Viscosidade dinâmica do componente puro k ($\text{kgm}^{-1}\text{s}^{-1}$)
Θ_{kj}	Parâmetro das equações (3.48) e (3.49)
ρ_a	Massa específica aparente da partícula (kg m^{-3})
ρ_{cinza}	Massa específica intrínseca de cinza (kg m^{-3})
$\rho_{cs,l}$	Massa específica intrínseca do combustível sólido seco (kg m^{-3})
ρ_{H_2O}	Massa específica da água (kg m^{-3})
ρ_m	Massa específica do fluido (kg m^{-3})

ρ_u	Massa específica intrínseca de umidade (kg m^{-3})
ρ_{vol}	Massa específica voláteis (kg m^{-3})
ρ_r	Massa específica real da partícula (kg m^{-3})
σ	Constante de Stefan-Boltzmann ($\text{W m}^{-2} \text{K}^{-4}$)
σ_k	Diâmetro de colisão (Å)
τ	Tortuosidade (-)
τ_{xy}	Tensão de cisalhamento (Pa)
Ω_D	Integral de colisão para gases apolares para a difusividade (-)
ψ	Parâmetro estrutural do modelo de área reativa (-)

SUMÁRIO

1.INTRODUÇÃO	1
2.OBJETIVOS	4
3.REFERENCIAL TEÓRICO	5
3.1 BIOMASSA.....	5
3.1.1 Propriedades químicas das partículas de biomassa.....	6
3.1.2 Características físicas das partículas de biomassa	7
3.1.3 Teor de umidade na biomassa.....	8
3.2 O PROCESSO DE SECAGEM.....	9
3.2.1 Modelos de evaporação da umidade (Mudança de fase da água).....	11
4.MODELAGEM MATEMÁTICA DO PROCESSO DE SECAGEM.....	13
4.1 ESTRUTURA POROSA DO SÓLIDO.....	13
4.1.1 Área superficial específica.....	15
4.2 EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO MÉDIAS NO VOLUME	16
4.2.1 Equações médias de conservação de quantidade de movimento e conservação de massa.....	16
4.2.2 Equação média de conservação da energia	17
4.2.3 Equação média de conservação de espécies	18
4.3 MODELOS MATEMÁTICOS PARA TAXA DE EVAPORAÇÃO	20
4.3.1 Modelo cinético	21
4.3.2 Modelo de equilíbrio térmico.....	22
4.3.2 Modelo convectivo.....	22
4.4 MODELO MATEMÁTICO DE PIRÓLISE	24
4.5 PROPRIEDADES TERMOFÍSICAS.....	25
4.5.1 Massa específica da mistura de gases	25
4.5.2 Calor específico da mistura de gases	25
4.5.3 Viscosidade e condutividade térmica da mistura de gases	26
4.5.4 Coeficiente efetivo de difusão de gases	27
4.5.5 Condutividade térmica do material sólido	30
4.5.6 Calor específico do material sólido.....	30
4.5.7 Permeabilidade.....	31
5.DETALHES DA SIMULAÇÃO.....	32

5.1 PRÉ-PROCESSAMENTO: GEOMETRIA E CONDIÇÕES DE CONTORNO...	32
5.2 CONDIÇÕES INICIAIS	35
5.3 SENSIBILIDADE DE MALHA	36
5.3.1 Independência de malha espacial	36
5.3.2 Independência de malha temporal.....	41
5.4 PROCESSAMENTO: SOLUÇÃO NUMÉRICA DO MODELO MATEMÁTICO.	
44	
6.RESULTADOS	45
6.1 CONSIDERAÇÕES	45
6.2 CONVERSÃO DE MASSA.....	46
6.3 PERFIS DE TEMPERATURA	51
6.4 CAMPOS DE TEMPERATURA, VELOCIDADE E POROSIDADE	56
6.5 RESULTADOS INERENTES A COMPARAÇÃO DO MODELO CINÉTICO, DE EQUILÍBRIO TÉRMICO E CONVECTIVO PARA O CÁLCULO DA TAXA DE CONVERSÃO DE MASSA E DOS PERFIS DE TEMPERATURA.....	52
7.CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	57
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	58

1. INTRODUÇÃO

Provavelmente a primeira fonte de energia térmica utilizada em larga escala pelo homem foi a biomassa, sendo perceptível que o desenvolvimento da humanidade está intimamente associado ao aumento do consumo energético das diversas fontes de energia.

A menos de 50 anos, mais da metade da energia consumida no Brasil provinha da madeira, não sendo este cenário particular, já que mais de metade da população do mundo se valia desse mesmo recurso energético (Cortez *et al.*, 2008).

Atualmente, em escalas diferentes de intensidade, a maioria dos países, sejam eles desenvolvidos ou não, está promovendo ações para inserir de maneira mais significativa as energias renováveis em suas matrizes energéticas, entre elas a biomassa. A postura dos países desenvolvidos e em desenvolvimento frente os investimentos em geração de energia por fontes renováveis está associada à necessidade de reduzir o uso de derivados de petróleo e, conseqüentemente a dependência energética em relação aos países exportadores de petróleo, bem como a redução das emissões de gases poluentes, particularmente o CO₂, um dos responsáveis pelo efeito estufa (Hall, 1995).

Embora não seja a mais utilizada entre os combustíveis sólidos, a biomassa vem se tornando uma fonte atrativa, pois é uma fonte renovável e sua aplicação, como combustível, fornece zero emissão de CO₂ ao meio ambiente, a grande maioria da biomassa apresenta baixo teor de cinzas, o que diminui problemas relacionados a resíduos, limpeza de equipamentos, e vários outros aspectos operacionais (Jenkins *et al.*, 1998).

Os processos de desenvolvimento, recuperação e revisão de tecnologias associadas ao aproveitamento da biomassa na produção energética é algo evidente, mobilizando setores acadêmicos, industriais, sociais e governamentais, contribuindo para um melhor equilíbrio das fontes de energias nas matrizes energéticas (Pereira *et al.*, 2008).

Segundo o Balanço Energético Nacional de 2012 (Brasil, 2012), a segunda principal fonte de energia no Brasil é proveniente da biomassa. Na produção de energia proveniente da biomassa estão incluídos álcool, carvão vegetal, bagaço, lenha e outros, mais da metade desta energia é consumida no setor industrial. Na utilização das energias renováveis, o Brasil é dos poucos países no mundo com potencial para substituir as energias fósseis.

O desenvolvimento de tecnologias associadas ao aproveitamento energético da biomassa é algo crescente. Diversos processos foram desenvolvidos visando à transformação da biomassa em energia, os que se destacam são: combustão direta,

gaseificação e pirólise. A combustão direta é a transformação da energia química da biomassa em calor, esta ocorre na queima do combustível em fornos ou caldeiras. Embora muito prático, o problema deste processo é a baixa eficiência, por causa da umidade presente na estrutura da biomassa e da baixa densidade energética de alguns combustíveis envolvidos, além de ser praticamente impossível obter a queima completa o que pode gerar grandes quantidades de emissões atmosféricas. A gaseificação é basicamente a conversão do combustível sólido ou líquido em gás energético por meio de reações termoquímicas. O gás resultante é uma mistura de CO_2 , H_2 , CO , CH_4 e N_2 , cujas proporções variam de acordo com as condições do processo. Este processo é bem mais eficiente do que a combustão direta. A pirólise ou carbonização é a degradação térmica da biomassa sem a presença de oxigênio, o que faz com que a biomassa se transforme em carvão que possui densidade energética duas vezes superior que a biomassa original (Bezzon, 1998).

Focando a análise em uma única partícula sólida, nota-se que, dada a entrada desta em um ambiente reativo (combustão ou gaseificação) processos físicos como transferência de calor e de massa são observados em diversos estágios, entre estes a secagem. A partícula é aquecida por convecção e radiação, o que ocasiona a perda de massa inicial devido à secagem, emissão de voláteis devido à degradação térmica do sólido, reações homogêneas de oxidação dos voláteis e, finalmente, oxidação do resíduo carbônico. A presença de vapor de água pode aumentar o volume de gases na câmara de combustão, o que diminui a temperatura de mistura de gás e reduz a taxa de combustão. Caldeiras podem tolerar um alto teor de umidade, no entanto, como o teor de umidade pode variar bastante de uma matéria-prima para a outra, grandes variações na operação de uma usina de energia a biomassa podem ocorrer durante a execução (Bridgwater, 1991).

A umidade tem um impacto significativo no processo global de combustão de biomassa, incluindo mudança nos produtos de pirólise e aumento do tempo global da combustão (Bilbao, 1996). Isto porque a evaporação da umidade consome calor, o que retarda o processo de decomposição do material e modifica os perfis de temperatura. Por conta do exposto constata-se a importância de se estudar a secagem sob condições de combustão.

A utilização da biomassa como fonte de energia é uma necessidade atual e futura. Para maximizar a eficiência de conversão da biomassa em energia é essencial a total compreensão dos processos de gaseificação e combustão, o que é algo muito complexo, pois envolve a compreensão de fenômenos físicos e químicos (secagem, pirólise, combustão e a gaseificação) que dependem de numerosos parâmetros físicos,

termodinâmicos e fluidodinâmicos, que se desenvolvem no espaço e no tempo. Assim, modelagem matemática e simulação numérica dos processos associados à combustão podem fornecer informações que podem ajudar no desenvolvimento de tecnologias que maximizem a conversão de biomassa em energia, bem como estratégias para redução na emissão de poluentes.

2. OBJETIVOS

Por conta do apresentado, coloca-se como objetivo do trabalho a modelagem da secagem de partículas sólidas de biomassa em temperaturas típicas de combustão. A modelagem será baseada na seleção adequada de equações de conservação da massa, quantidade de movimento e espécies químicas, para o meio fluido (que envolve a partícula) e para a partícula sólida (considerada porosa). Serão utilizados três modelos de conversão de massa devido à evaporação (mudança de fase de água), sendo estes, cinético, de equilíbrio térmico e convectivo. Também será considerado um modelo para pirólise da biomassa (degradação térmica do material). A validação da modelagem proposta com dados experimentais obtidos da literatura caracteriza outro objetivo do proposto.

3. REFERENCIAL TEÓRICO

3.1 BIOMASSA

Em geral, denomina-se biomassa qualquer matéria de origem vegetal renovável (lenhoso ou não), como é o caso da madeira e seus resíduos, e resíduos orgânicos (resíduos urbanos, industriais e agrícolas), de origem recente na qual podem ser processadas para fornecer alternativas bioenergéticas adequadas para um uso final (Zhang & Smith, 2007). Na Fig. (3.1) destacam-se os principais tipos de biomassa para geração de energia.

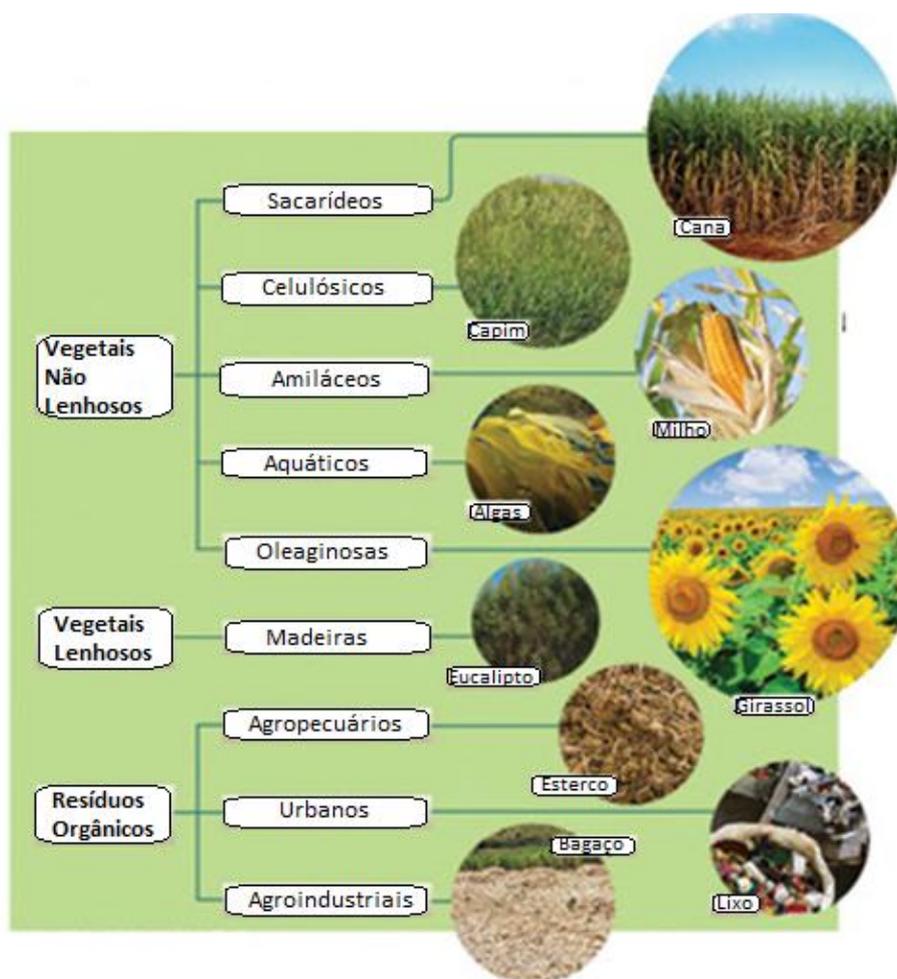


Figura 3.1 - Fontes de Biomassa
(Brasil, 2012 (Adaptado))

Os resíduos florestais são todos materiais deixados para trás na coleta da madeira (folhas, galhos e material de destoca), tanto em florestas naturais como em reflorestamento, e pela serragem e aparas produzidas no processamento da madeira. Esse tipo de biomassa constitui parte importante na disponibilidade da biomassa em alguns países pelas grandes quantidades geradas na colheita e na ação industrial.

3.1.1 Propriedades químicas das partículas de biomassa

A Biomassa é em sua maior parte composta por celulose, hemicelulose e lignina, em diferentes proporções. Podendo então o rendimento dos processos que envolvam diferentes tipos de biomassas (combustão, pirólise, etc.), mesmo que nas mesmas condições operacionais, ser diferente, devido sua composição (Azevedo, 1994). Na Tab. (3.1) é possível visualizar a composição química de alguns tipos de biomassa.

Tabela 3.1 – Composição química de biomassa

Biomassa	Celulose (%)	Hemicelulose (%)	Lignina (%)
Palha de cana	40-44	30-32	22-25
Bagaço de cana	32-28	20-24	23-32
Madeira dura	43-47	25-35	16-24
Madeira mole	40-44	25-29	25-31
Palha de arroz	42-44	25-27	15-17
Espiga de milho	44-48	35-37	15-20

Fonte: Souza *et al.*, 2012 (Adaptado)

O avanço dado à utilização de biomassa como combustível, por motivos ambientais ou econômicos, exige um maior cuidado em quanto à caracterização da biomassa. Entre os métodos para caracterização dos diferentes tipos de biomassa, estão, a análise imediata e a análise elementar.

A análise imediata fornece as frações em peso de umidade, voláteis, cinzas e carbono fixo de uma amostra de biomassa. Já a análise elementar fornece as frações em peso dos elementos constituintes da biomassa. Os principais elementos que compõem a biomassa são, carbono (C), oxigênio (O) e hidrogênio (H), porém concentrações de nitrogênio (N), enxofre (S), cloro (Cl) e outros também podem ser levantadas (Lee, 1997).

Na Tabela (3.2) são apresentados os dados de análise elementar e na Tab. (3.3) os dados de análise imediata de algumas biomassas.

Tabela 3.2 - Composição elementar de biomassa base seca

BIOMASSA	COMPOSIÇÃO ELEMENTAR (%)					
	C	H	O	N	S	RESÍDUO
Bagaço de cana	44,8	5,4	39,6	0,38	0,01	9,79
Eucalipto	49,0	5,9	44,0	0,30	0,01	0,72
Resíduos florestais (pellets)	49,8	6,7	38,0	3,0	*	2,5
Casca de arroz	41,1	5,7	31,9	4,0	1,2	16,1
Serragem	48,9	5,8	43,3	0,3	0,1	1,6

(C) carbono, (H) hidrogênio, (O) oxigênio, (N) nitrogênio, (S) enxofre,

* Parâmetro não encontrado

Fonte: Cortez, 2008 (Adaptado)

Tabela 3.3 - Composição imediata de biomassa base seca

BIOMASSA	COMPOSIÇÃO IMEDIATA (%)		
	Voláteis	Carbono fixo	Cinzas
Bagaço de cana	73,8	15,0	11,2
Eucalipto	81,4	17,8	0,8
Casca de coco	68,0	23,8	8,2
Casca de arroz	65,5	16,7	17,8
Serragem	69,3	13,4	17,3

Fonte: Cortez, 2008 (Adaptado)

3.1.2 Características físicas das partículas de biomassa

Existem diversos aspectos relativos às propriedades físicas dos combustíveis sólidos como a biomassa, as que se destacam são:

- Forma da partícula
- Tamanho da partícula

Para simulação o parâmetro forma mais utilizado para descrever uma partícula é a esfericidade (Gadiou *et al*, 2002). Vale ressaltar que as partículas encontradas na natureza dificilmente são de formato esférico, logo se calcula a esfericidade destas, que seria a medição do afastamento do formato da partícula com o de uma esfera. A esfericidade varia de 0 a 1, e pode ser calculada como mostrado na Eq. (3.1):

$$\emptyset = \frac{\text{Superfície da Esfera de igual volume da partícula}}{\text{Superfície externa da partícula}} \quad (3.1)$$

A caracterização de uma partícula com relação ao tamanho é definida por uma ou mais dimensões lineares. Por exemplo, uma esfera e um cubo são caracterizados apenas com uma dimensão, diâmetro e aresta, respectivamente, assim como um cone é definido por duas dimensões, diâmetro da base e altura. No caso de partículas irregulares estas são caracterizadas, em geral, com base em alguma propriedade de referência que depende da aplicação pretendida (Reina *et al.*, 2000).

3.1.3 Teor de umidade na biomassa

A biomassa sempre apresenta conteúdo de umidade relevante, e este dificulta a queima deste combustível, reduz seu poder calorífico e aumenta o volume de produtos de combustão gerado (Di Blasi, 2008).

O teor de umidade de uma partícula de biomassa pode ser expresso tanto em base seca como em base úmida. O teor de umidade em base úmida é a relação entre a massa de água e a massa total do produto, seu equacionamento é mostrado na Eq. (3.2):

$$Y_{bu} = \frac{m_{H_2O}}{m_s + m_{H_2O}} \quad (3.2)$$

Em que Y_{bu} é o teor de umidade em base úmida, m_{H_2O} é a massa de água contida na biomassa (kg) e m_s é a massa de matéria seca (kg).

O teor de umidade em base seca é a relação entre a massa de água contida na biomassa e a massa de matéria seca, seu equacionamento é mostrado na Eq. (3.3):

$$Y_{bs} = \frac{m_{H_2O}}{m_s} \quad (3.3)$$

Onde Y_{bs} é o teor de umidade, em base seca. No presente trabalho a umidade da partícula será considerada em base seca.

O teor de umidade, em base úmida, geralmente é expresso em porcentagem, uma vez que é uma variável cujo valor está entre 0% e 100%. Já o teor de umidade em base seca é geralmente expresso em decimal, uma vez que essa variável pode ter valores entre zero e infinito e, portanto, não faz sentido expressar os valores em porcentagem (Brooker *et al.*, 1995).

Segundo Brooker *et al.* (1995) a quantidade de água removida durante a secagem da biomassa pode ser calculada a partir da Eq. (3.4).

$$m_{H_2O_i} - m_{H_2O_f} = \frac{Y_i - Y_f}{100 - Y_f} m_{ti} \quad (3.4)$$

Onde $m_{H_2O_i}$ é a massa de água inicial contida no produto (% , em base úmida), $m_{H_2O_f}$ é a massa de água final contida no produto (% , em base úmida), m_{ti} é a massa inicial total do produto (kg), Y_i é o teor de umidade inicial e Y_f é o teor de umidade final.

3.2 O PROCESSO DE SECAGEM

O cenário para a combustão de partículas de biomassa pode ser descrito em diferentes etapas. Quando as partículas são introduzidas pela primeira vez no forno, estas começam a aquecer, e o teor de água destas começa a ser evaporado após atingir a temperatura de evaporação, sendo esta temperatura constante durante o processo de secagem, a secagem no presente trabalho ocorre devido o contato fluxo de gás à alta temperatura e partícula. Após o término do processo de secagem a temperatura no interior da partícula volta a aumentar até o patamar do processo de pirólise.

A água contida na biomassa se apresenta em diferentes formas, em função da natureza das ligações químicas existentes entre os componentes da matéria seca e as moléculas de água. Segundo Krabbenhoft (2003) a umidade presente em sólidos porosos como a biomassa ocorre basicamente de três formas:

- i) Água adsorvida (ligada) no interior da estrutura porosa do material pode ser considerada parte integrante da substância, isto é, uma camada monomolecular combinada por intermédio de ligações químicas com a substância.
- ii) Água livre no interior dos poros existentes no material, incluindo umidade superficial, isto é, é mantida no material, mecanicamente, pelas paredes celulares, a camada monomolecular da água adsorvida funciona como estrutura de suporte, e não é afetada por essa.
- iii) Vapor de água que é líquido livre, mas em vapor.

Segundo Di Blasi (1997) o termo sorção é usado para denotar tal interação água-substância adsorvedora, os termos gerais adsorção e dessorção são usados especialmente para denotar o processo de ganhar ou perder água por sorção, respectivamente.

Existe um limite para a quantidade de água que pode ser adsorvida pela biomassa, que é referenciado de ponto de saturação das fibras (PSF). Este ponto é de grande importância, pois a retirada da água livre não afeta a estrutura da biomassa, porém quando a umidade ultrapassa o PSF do material, esta se reduz de tamanho, iniciando o processo de encolhimento.

Segundo Bellais (2007) e Krabbenhoft (2003) na secagem de material úmido, podem ocorrer dois processos simultaneamente:

- i) transferência da umidade interna para a superfície do sólido, o mecanismo de transferência de calor e massa responsável por esta migração da umidade do centro do sólido para a superfície geralmente é o de difusão, ocorre a nível molecular.
- ii) transferência de energia para evaporar a umidade superficial da partícula, principalmente como calor; nesta etapa do processo de secagem o mecanismo de transferência de calor e massa que atua na superfície do sólido é a convecção, ocorre a nível macro.

Na Figura (3.2) é possível visualizar os mecanismos de difusão e convecção de umidade em um material poroso.

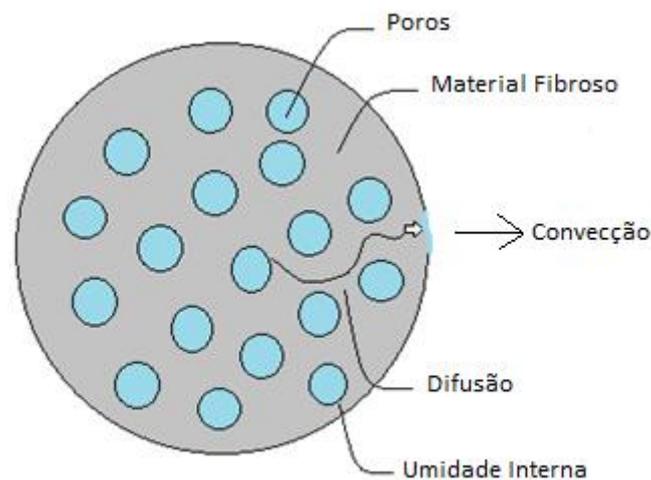


Figura 3.2 - Mecanismos de difusão e convecção de umidade em material poroso

Complementando o que já foi dito, há um equilíbrio termodinâmico entre o vapor de água e a água livre, quando se esgota a água livre, a água ligada começa a evaporar. Com o aumento de temperatura, há o aumento da pressão de saturação dentro da partícula, isso resulta em uma difusão mais rápida, ou seja, o processo de migração da umidade

interna da partícula para a superfície desta é mais rápido. Se a pressão de vapor de água torna-se maior do que a pressão externa, em seguida, ocorre o processo de advecção, aonde o vapor de água da superfície move-se para fora da partícula (Di Blasi, 1997; Cenkowski *et al.*, 1993). A água ligada por ser parte integrante da substância, só pode ser removida do material sob rigorosas condições de temperatura e tempo, e sua retirada provoca alterações dimensionais na biomassa, uma vez que está ligada a estrutura da mesma. A água ligada não vaporiza de maneira similar à água livre, esta é geralmente liberada como resultado de reações químicas que liberam hidratos ligados e processos semelhantes. Já a água livre é facilmente evaporada com o aumento de temperatura, e sua perda não provoca grandes alterações dimensionais no material (Bryden *et al.*, 2002; Pinheiro *et al.*, 1998).

3.2.1 Modelos de evaporação da umidade (Mudança de fase da água)

Na literatura figuram basicamente três tipos básicos de modelos de evaporação de umidade na madeira sob fluxos de calor de combustão: modelo de equilíbrio térmico (i), modelo cinético (ii) e o modelo convectivo (iii).

- i) **Modelo de Equilíbrio Térmico:** Baseia-se no pressuposto de que a secagem ocorre a uma temperatura de ebulição fixa, a secagem atua como um dissipador de calor. Um sumidouro de energia a 100°C representa o calor de vaporização. Considera que a zona de secagem é infinitamente fina, e que não há resistência à transferência de massa, sendo que o vapor de água sai instantaneamente da partícula (Palchonok, 1998).
- ii) **Modelo Cinético:** Modela-se a taxa de evaporação utilizando uma equação cinética de primeira ordem, como uma equação de Arrhenius (permite calcular a variação da constante de velocidade de uma reação química com a temperatura). O fator de pré-exponencial e a energia de ativação são calculados do modo que exista um grande aumento na taxa de secagem a 100°C. Os resultados deste modelo correspondem aos resultados experimentais. A principal desvantagem é que devido à utilização de uma expressão de Arrhenius para a secagem, muitos fenômenos físicos diferentes estão agrupados em uma única expressão (Chan *et al.*, 1985; Ouelhazi *et al.*, 1992).
- iii) **Modelo Convectivo:** Baseia-se na hipótese de que o vapor de água está em equilíbrio com a água livre e a fase ligada. A pressão parcial de vapor de água é fixada pela pressão de saturação, simplificação típica de modelos de secagem

para baixas temperaturas, porém alguns autores consideram que a hipótese mantém a secagem em alta temperatura (Di Blasi, 1997; Larfeldt *et al.*, 2000). Modelos de equilíbrio são problemas naturais de equações diferenciais algébricas, dependentes tanto da transferência de calor quanto da transferência de massa (Alves & Figueiredo, 1989). Todos os cálculos são realizados supondo equilíbrio termodinâmico na interface entre o gás e a fase líquida, em que a temperatura do vapor na interface é igual à temperatura da superfície. Uma implicação do equilíbrio é que o vapor d'água se encontra em um estado saturado.

Em Bellais (2007) os modelos de secagem (i), (ii) e (iii) mencionados anteriormente foram comparados. Os experimentos e simulações foram realizados para uma temperatura externa variando de 360 a 580 °C. Segundo o autor do trabalho, a principal conclusão da comparação entre o experimental e os resultados preditos pelos modelos foi que não existia virtualmente nenhuma diferença entre as predições dos três modelos de secagem quanto à predição da taxa global de secagem.

Na grande maioria dos modelos comentados a movimentação da água em múltiplas direções e o impacto da onda de pressão dentro de uma partícula durante o processo de secagem não são considerados.

4. MODELAGEM MATEMÁTICA DO PROCESSO DE SECAGEM

No presente trabalho propõe-se um conjunto de equações de conservação (quantidade de movimento, massa, energia e de espécies), juntamente com outras equações auxiliares que permitam o estudo da secagem de partículas de biomassa. Para tornar possível a solução numérica de um problema desta complexidade, algumas hipóteses simplificadoras se fazem necessárias, a saber:

- A partícula sólida será tratada como um meio poroso rígido, com estrutura homogênea e isotrópica;
- A água ligada e água livre serão simplesmente designadas de umidade. Não será considerada nenhuma distinção entre ambas na estrutura porosa. Uma única taxa de conversão (taxa de evaporação) de umidade será utilizada;
- Pela rapidez com que a mudança de fase ocorre nas temperaturas típicas de combustão, considera-se que a mudança de fase é muito mais rápida do que a mobilidade da umidade. Assim, considera-se que a umidade não possui qualquer mobilidade devido difusão ou advecção. No entanto, depois da conversão da umidade em vapor, este pode se movimentar na estrutura porosa por meio de advecção e difusão;
- Devido a imobilidade, a umidade será tratada como um constituinte sólido. Uma fração de volume do sólido será atribuída à umidade. Além disso, considera-se que a saída de umidade do sólido não provoca dilatação ou contração do sólido. Porém a conversão de umidade reduz o volume efetivamente ocupado pelo sólido, ou seja, altera a porosidade do meio poroso. Por conta disso, a conversão de umidade altera também a permeabilidade do meio poroso.

Além do já exposto, a modelagem do meio poroso que constitui a partícula, e do fluido que envolve a partícula, é exposta a seguir.

4.1 ESTRUTURA POROSA DO SÓLIDO

Para elaboração do modelo de estrutura porosa a Fig. (4.1), que apresentada à estrutura de fibra de madeira dura, será considerada como referencia. No presente trabalho o volume ocupado pelas fibras da biomassa será referenciado por V_S e o volume ocupado

pelos gases, dentro dos poros, por V_G . Assim o volume total V_T da biomassa é composto pelo volume ocupado pelas fibras de biomassa (V_S) e pelo volume de vazios (V_G).

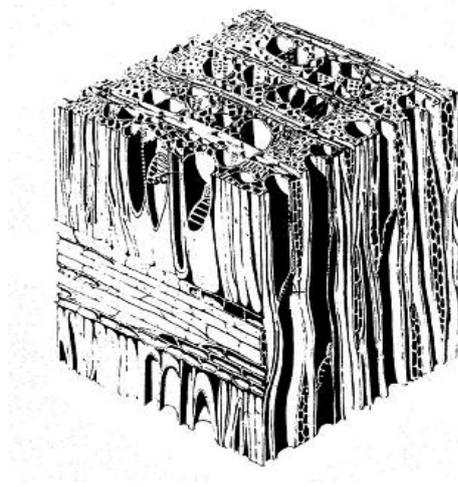


Figura 4.1 - Estrutura de fibra de madeira dura
(Thunman, 2004)

A fração de volume de vazios de um sólido é chamada de porosidade e é definida a partir das relações apresentadas nas Eq. (4.1), Eq. (4.2), Eq. (4.3), Eq. (4.4) e Eq. (4.5) (Gadiou *et al*, 2002):

$$\varepsilon = 1 - \frac{\rho_a}{\rho_r} \quad (4.1)$$

$$\rho_a = \frac{m_p}{V_T} \quad (4.2)$$

$$\rho_r = \frac{m_p}{V_S} \quad (4.3)$$

$$V_S = V_T - V_G \quad (4.4)$$

$$\varepsilon = \frac{V_G}{V_T} \quad (4.5)$$

Onde ρ_a é a massa específica aparente da partícula, que é a razão entre a massa da partícula (m_p) e seu volume total (V_T). Já ρ_r é a massa específica real, que consiste na razão entre a massa de uma partícula (m_p) e o volume exclusivamente ocupado pelas fibras de biomassa (V_S).

Pelo que foi exposto, pode-se inferir que a massa específica aparente ρ_a se relaciona com a massa específica real ρ_r , na qual: $\rho_a = \rho_r (1 - \varepsilon)$. Desta forma, a massa específica aparente varia diretamente com a porosidade. Da mesma forma coloca-se o volume de material sólido variando com a porosidade: $V_S = (1 - \varepsilon)V_T$.

Para simplificar o estudo a fração de volume de material sólido $(1 - \varepsilon)$ será dividida entre os componentes do sólido: fração de volume de cinza, fração de volume combustível sólido seco e fração de volume de umidade, representados respectivamente por X_{cinza} , X_{cs} e X_u . Assim $(1 - \varepsilon) = X_{cinza} + X_{cs} + X_u$, ou seja, a porosidade pode ser calculada pelas frações de volume dos constituintes do sólido e as frações de volume podem ser calculadas em função da variação de massa como mostrado na Eq. (4.6):

$$X_i = \frac{m_i}{(\rho_{i,l}V_T)} \quad (4.6)$$

Onde i pode ser cinza, combustível sólido seco (cs) ou umidade (u). O termo $\rho_{i,l}$ representa a massa específica intrínseca dos constituintes do sólido.

Para efeito de cálculo será considerado que a massa específica intrínseca da biomassa, $\rho_{cs,l}$, fica em torno de 1500 kg/m^3 , a massa específica intrínseca da cinza, $\rho_{cinza,l}$, fica em torno de 2260 kg/m^3 e a massa específica intrínseca de umidade, $\rho_{u,l}$, igual 1000 kg/m^3 .

Finalmente, a massa de cada volume elementar que compõe a partícula sólida pode ser calculada como:

$$m_s = \rho_{s,l}(1 - \varepsilon)V_T = \underbrace{\rho_{cs,l}X_{cs}V_T}_{\text{massa de combustível sólido}} + \underbrace{\rho_{c,l}X_cV_T}_{\text{massa de coque}} + \underbrace{\rho_{cinza,l}X_{cinza}V_T}_{\text{massa de cinza}}$$

4.1.1 Área superficial específica

A área superficial específica (m^2/m^3) é uma das principais características do meio poroso, definida a partir da Eq. (4.7):

$$S = \frac{\text{Área Superficial}}{V_T} \quad (4.7)$$

Considerando distribuição homogênea de poros cilíndricos, cujo número permanece inalterado durante o processo de secagem, pode-se calcular a área superficial específica dos poros como mostrado na Eq. (4.8) (Bird *et al.*, 2001):

$$S = \frac{6(1-\varepsilon)}{d_p} \quad (4.8)$$

onde d_p é o diâmetro dos poros.

Na Figura (4.2) é possível visualizar a idealização de uma estrutura porosa.

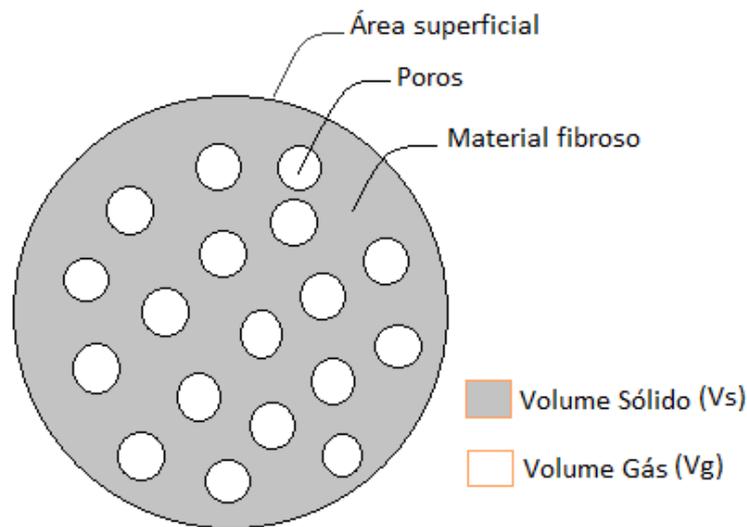


Figura 4.2 - Estrutura porosa idealizada

4.2 EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO MÉDIAS NO VOLUME

Geralmente as equações de conservação da massa, de quantidade de movimento e da energia são deduzidas a partir da hipótese do contínuo. Tais equações podem ser utilizadas em meios porosos se um procedimento de média adequado for utilizado. Por conta disso, a seguir são apresentadas as equações de conservação de quantidade de movimento, conservação da energia e conservação de espécies químicas, médias no volume. Para facilitar a leitura das equações, a notação de média volumétrica foi omitida de todos os termos das equações.

4.2.1 Equações médias de conservação de quantidade de movimento e conservação de massa

Conforme Whitaker (2006), a partir da aplicação de um procedimento de média volumétrica formal às equações de Navier-Stokes e considerando escoamento incompressível e fluido Newtoniano, as equações de conservação da massa (Eq. 4.9) e quantidade de movimento (Eq. 4.10) podem ser escritas como:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon \rho) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = \varepsilon \dot{\omega}_{pir} + \varepsilon \dot{\omega}_{secagem} \quad (4.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho \mathbf{u}}{\varepsilon} \right) + \nabla \cdot \left(\frac{\rho \mathbf{u} \mathbf{u}}{\varepsilon^2} \right) = -\nabla p + \rho g + \nabla \cdot \left(\frac{\mu_e \nabla u}{\varepsilon} \right) + (\nabla p)_p \quad (4.10)$$

$$(\Delta p)_p = -\frac{\mu_g}{K} \mathbf{u} - C_F \frac{\rho}{\sqrt{K}} \frac{|\mathbf{u}| \mathbf{u}}{\varepsilon^{3/2}} \quad (4.11)$$

Nas equações, a velocidade \mathbf{u} , chamada de velocidade de Darcy, não é uma velocidade física, e sim uma velocidade superficial baseada na seção transversal completa do meio. De acordo com Nield & Bejan (2006) a velocidade de Darcy \mathbf{u} e a velocidade média intrínseca \mathbf{V} (velocidade real no meio poroso) estão relacionadas por meio da relação de Dupuit-Forchheimer: $\mathbf{u} = \varepsilon \mathbf{V}$, onde ε é a porosidade.

Na equação (4.9) o termo $\dot{\omega}_{pir}$ representa a fonte de massa devido à degradação térmica do meio sólido (pirólise) e o termo $\dot{\omega}_{secagem}$ representa a fonte de massa devido as reações heterogêneas do processo de secagem, sendo H_2O a espécie gerada.

Na equação (4.10) o primeiro termo viscoso, $\nabla \cdot \left(\frac{\mu_e \nabla u}{\varepsilon} \right)$, é o termo de Brinkman e o último termo, $(\nabla p)_p$, é o de Darcy-Forchheimer, introduzidos na equação para modelar os efeitos microscópicos do meio poroso no campo de escoamento.

Na equação (4.11) o termo C_F é o coeficiente de Forchheimer, geralmente obtido de maneira semi-empírica e K é a permeabilidade específica do meio poroso, que possui unidade de comprimento quadrado, ou unidade de Darcy ($0,987 \times 10^{-12}$ m²). Notar que a permeabilidade foi apresentada como um escalar devido à consideração de isotropia do meio poroso.

As equações (4.9) e (4.10) também serão utilizadas para modelar o escoamento do fluido no meio puramente fluido. Para isso foi assumido porosidade unitária, termo de Darcy-Forchheimer e termo de fonte de massa nulos.

4.2.2 Equação média de conservação da energia

A equação de conservação da energia, média no volume para um meio poroso e que considera o equilíbrio térmico entre as fases é dada apresentado na Eq. (4.12) (Viskanta, 2005):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho c_p T_g) + \nabla \cdot (\rho_g c_{p,g} \mathbf{u} T_g) = \nabla \cdot (k \nabla T_g) + S_{T,g} \quad (4.12)$$

Onde $\rho c_p = (1 - \varepsilon) \rho_{s,l} c_{p,s} + \varepsilon \rho_g c_{p,g}$ e $k = (1 - \varepsilon) k_s + \varepsilon k_g + k_{rad}$. E $c_{p,g}$ e k_g são calor específico e condutividade térmica do material gasoso e $c_{p,s}$ e k_s são calor específico e condutividade térmica do material sólido. Adicionalmente $\rho_{s,l}$ é a massa específica

intrínseca do material sólido. O efeito da transferência de calor radiativa foi incorporado através do aumento da condutividade pelo k_{rad} . O primeiro termo da Eq. (4.12) representa a acumulação e o segundo a advecção de energia; depois do sinal de igualdade o primeiro termo contabiliza a transferência de energia devido à difusão e o último termo representa o termo de fonte da equação de energia, dado explicitamente como apresentado na Eq. (4.13) (Viskanta, 2005):

$$S_{T,g} = -\varepsilon \sum_{k=1}^{N_{sp}} \dot{\omega}_{g,k} h_k + Q_{rad} + \varepsilon \dot{\omega}_{pir} H_{pir} + \varepsilon \sum_{k=1}^{N_{R,S}} \dot{\omega}_{secagem,k} H_k \quad (4.13)$$

O termo $\varepsilon \sum_{k=1}^{N_{sp}} \dot{\omega}_{g,k} h_k$ representa a geração de calor devido às reações químicas homogêneas. Já os termos $\dot{\omega}_{pir} H_{pir}$ e $\sum_{k=1}^{N_{R,S}} \dot{\omega}_{secagem,k} H_k$ representam fontes de energia devido à pirólise e às reações heterogêneas, respectivamente. H_{pir} é o calor de reação devido à pirólise e H_k é calor de reação devido às reações heterogêneas (secagem). Já o termo Q_{rad} representa potência radiativa trocada entre o meio ambiente e a partícula, que pode ser expressa da seguinte forma: $Q_{rad} = A_{sup} \sigma \varepsilon_{rad} (T_{rad}^4 - T_s^4)$, onde A_{sup} é a área superficial que envolve a partícula e os parâmetros σ e ε_{rad} são a constante de Stefan-Boltzmann ($\text{W/m}^2\text{K}^4$) e emissividade radiativa da partícula, respectivamente. Além disso, T_{rad} é a temperatura de referencia do meio poroso e a temperatura da superfície é representada por T_s . No caso apresentado a troca de calor por radiação só contabiliza a troca de energia para os nós localizados na superfície da partícula.

4.2.3 Equação média de conservação de espécies

Para um sistema monofásico multicomponente a equação média volumétrica de conservação de espécies, de acordo com Viskanta (2005), é dada para cada espécie, Eq. (4.14) para O_2 , Eq. (4.15) para H_2O , Eq. (4.16) para N_2 , Eq. (4.17) para CO , Eq. (4.18) para CO_2 , Eq. (4.19) para CH_4 , Eq. (4.20) para H_2 e Eq. (4.21) para C_6H_6 :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon \rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_i) = -\nabla \cdot (\varepsilon \mathbf{J}_k) + \varepsilon \dot{\omega}_{g,k} + \varepsilon f_{pir,k} \dot{\omega}_{pir} + \varepsilon \dot{\omega}_{secagem,k}, \quad k = 1, 2, \dots, N_{sp}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon \rho Y_{O_2}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_{O_2}) = \nabla \cdot (\varepsilon \rho D_{O_2,eff} \nabla Y_{O_2}) \quad (4.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon \rho Y_{H_2O}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_{H_2O}) = \nabla \cdot (\varepsilon \rho D_{H_2O,eff} \nabla Y_{H_2O}) + \varepsilon \dot{\omega}_{secagem,H_2O} + \varepsilon f_{pir,H_2O} \dot{\omega}_{pir} \quad (4.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon\rho Y_{N_2}) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}Y_{N_2}) = \nabla \cdot (\varepsilon\rho D_{N_2,eff}\nabla Y_{N_2}) \quad (4.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon\rho Y_{CO}) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}Y_{CO}) = \nabla \cdot (\varepsilon\rho D_{CO,eff}\nabla Y_{CO}) + \varepsilon f_{pir,CO}\dot{\omega}_{pir} \quad (4.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon\rho Y_{CO_2}) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}Y_{CO_2}) = \nabla \cdot (\varepsilon\rho D_{CO_2,eff}\nabla Y_{CO_2}) + \varepsilon f_{pir,CO_2}\dot{\omega}_{pir} \quad (4.18)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon\rho Y_{CH_4}) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}Y_{CH_4}) = \nabla \cdot (\varepsilon\rho D_{CH_4,eff}\nabla Y_{CH_4}) + \varepsilon f_{pir,CH_4}\dot{\omega}_{pir} \quad (4.19)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon\rho Y_{H_2}) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}Y_{H_2}) = \nabla \cdot (\varepsilon\rho D_{H_2,eff}\nabla Y_{H_2}) + \varepsilon f_{pir,H_2}\dot{\omega}_{pir} \quad (4.20)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon\rho Y_{C_6H_6}) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}Y_{C_6H_6}) = \nabla \cdot (\varepsilon\rho D_{C_6H_6,eff}\nabla Y_{C_6H_6}) + \varepsilon f_{pir,C_6H_6}\dot{\omega}_{pir} \quad (4.21)$$

A acumulação transiente de espécies é contabilizada pelos termos $\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon\rho Y_k)$ e os termos $\nabla \cdot (\rho\mathbf{u}Y_k)$ representam a advecção de espécies químicas. Já os termos $\nabla \cdot (\varepsilon\rho D_{k,eff}\nabla Y_k)$ representa a difusão de espécies. Sendo k qualquer uma das espécies: O₂, H₂O, N₂, H₂, CO, CO₂, CH₄ e C₆H₆. Os termos $\dot{\omega}_{g,k}$, $f_{pir,k}\dot{\omega}_{pir}$ e $\varepsilon\dot{\omega}_{secagem,k}$ são fontes para cada espécie k (geração ou destruição de massa) devido as reações homogêneas, pirólise e reações heterogêneas, respectivamente. Sendo $f_{pir,k}$ o termo que representa as frações de massa das seis espécies geradas no processo de pirólise: H₂O, H₂, CO, CO₂, CH₄ e C₆H₆. As frações de massa serão apresentadas junto ao modelo matemático de Pirólise.

O somatório das equações de conservação de espécies supracitadas (4.14) a (4.21):

$$\sum_{k=1}^{N_{esp}} \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon\rho Y_k) + \sum_{k=1}^{N_{esp}} \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}Y_k) = \sum_{k=1}^{N_{esp}} \nabla \cdot (\varepsilon\rho D_{k,eff}\nabla Y_k) + \sum_{k=1}^{N_{esp}} S_k$$

deve resultar na equação da conservação de massa Eq. (3.9), N_{esp} representa o número de espécies consideradas e o termo $\sum_{k=1}^{N_{esp}} S_k$ representa o somatório dos termos de fonte ($\dot{\omega}_{g,k}$, $f_{pir,k}\dot{\omega}_{pir}$ e $\varepsilon\dot{\omega}_{s,k}$). Para que isso ocorra a soma dos termos de fluxo de difusão de espécies deve ser nulo:

$$\sum_{k=1}^{N_{esp}} \nabla \cdot (\varepsilon\rho D_{k,eff}\nabla Y_k) = 0$$

O que não ocorre naturalmente quando o fluxo de difusão é de Fick. Para garantir tal nulidade foi introduzido um termo de correção J_c:

$$\sum_{k=1}^{N_{esp}} \nabla \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} \rho D_{k,eff} \nabla Y_k) + \mathbf{Jc} = 0$$

$$\text{Onde: } \mathbf{Jc} = - \sum_{k=1}^{N_{esp}} \nabla \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} \rho D_{k,eff} \nabla Y_k)$$

Tal correção será incorporada em cada equação de conservação e sua distribuição será proporcional à fração de massa de cada espécie química, estas são apresentadas nas Equações (4.22) a (4.29):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\boldsymbol{\varepsilon} \rho Y_{O_2}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_{O_2}) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} \rho D_{O_2,eff} \nabla Y_{O_2}) + \mathbf{Jc} Y_{O_2} \quad (4.22)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\boldsymbol{\varepsilon} \rho Y_{H_2O}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_{H_2O}) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} \rho D_{H_2O,eff} \nabla Y_{H_2O}) + \boldsymbol{\varepsilon} \dot{\omega}_{Secagem,H_2O} + \boldsymbol{\varepsilon} f_{pir,H_2O} \dot{\omega}_{pir} + \mathbf{Jc} Y_{H_2O} \quad (4.23)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\boldsymbol{\varepsilon} \rho Y_{N_2}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_{N_2}) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} \rho D_{N_2,eff} \nabla Y_{N_2}) + \mathbf{Jc} Y_{N_2} \quad (4.24)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\boldsymbol{\varepsilon} \rho Y_{CO}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_{CO}) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} \rho D_{CO,eff} \nabla Y_{CO}) + \boldsymbol{\varepsilon} f_{pir,CO} \dot{\omega}_{pir} + \mathbf{Jc} Y_{CO} \quad (4.25)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\boldsymbol{\varepsilon} \rho Y_{CO_2}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_{CO_2}) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} \rho D_{CO_2,eff} \nabla Y_{CO_2}) + \boldsymbol{\varepsilon} f_{pir,CO_2} \dot{\omega}_{pir} + \mathbf{Jc} Y_{CO_2} \quad (4.26)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\boldsymbol{\varepsilon} \rho Y_{CH_4}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_{CH_4}) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} \rho D_{CH_4,eff} \nabla Y_{CH_4}) + \boldsymbol{\varepsilon} f_{pir,CH_4} \dot{\omega}_{pir} + \mathbf{Jc} Y_{CH_4} \quad (4.27)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\boldsymbol{\varepsilon} \rho Y_{H_2}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_{H_2}) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} \rho D_{H_2,eff} \nabla Y_{CO_2}) + \boldsymbol{\varepsilon} f_{pir,CO_2} \dot{\omega}_{pir} + \mathbf{Jc} Y_{H_2} \quad (4.28)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\boldsymbol{\varepsilon} \rho Y_{C_6H_6}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_{C_6H_6}) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} \rho D_{C_6H_6,eff} \nabla Y_{C_6H_6}) + \boldsymbol{\varepsilon} f_{pir,C_6H_6} \dot{\omega}_{pir} + \mathbf{Jc} Y_{C_6H_6} \quad (4.29)$$

A correção adotada para o fluxo de difusão é conhecida na literatura como correção de Curtiss-Hirschfelder (Curtiss & Hirschfelder, 1952).

As equações de conservação de espécies supracitadas também serão utilizadas para modelar o transporte de espécies no meio puramente fluido. Para isso foi assumido porosidade unitária, termos de fonte devido conversão de massa nulos e o coeficiente de difusão efetivo serão simplesmente os coeficiente de difusão no seio da fase gasosa.

4.3 MODELOS MATEMÁTICOS PARA TAXA DE EVAPORAÇÃO

Nas equações apresentadas até então um termo aparece repetidamente: $\dot{\omega}_{secagem,H_2O}$, podendo este também ser escrito da seguinte forma: $\frac{d}{dt} (\rho_{H_2O})$. Este termo representa a taxa

de evaporação de umidade da partícula. É um dos principais parâmetros para se modelar. Na literatura verificou-se que três modelos eram os mais utilizados para modelar a taxa de conversão de massa úmida em massa seca, sendo estes: modelo cinético, modelo de equilíbrio térmico e modelo convectivo. Para resolução do conjunto de equações apresentados a seguir será utilizado um código numérico apresentado em Cunha (2010).

4.3.1 Modelo cinético

Em Chan et al., (1985), Krieger-Brackett & Glaister, (1988), Babalis & Belessiotis, (2004) e Pereira et al., (2008), Cunha, (2010), a secagem é modelada por meio do modelo de taxa cinética, similar a uma reação heterogênea, aqui referenciado como cinético. A taxa de evaporação de umidade neste caso é calculada a partir da Eq. (4.30):

$$\dot{\omega}_{\text{secagem}, H_2O} = \frac{d\rho_{H_2O}}{dt} = -k_{H_2O} \rho_{H_2O} \quad (4.30)$$

Onde $k_{H_2O} = A e^{-\frac{E}{RT}}$, sendo A_{secagem} , E_{secagem} e T_s , fator de frequência, energia de ativação e temperatura do sólido, respectivamente.

Isolando os termos semelhantes da Eq. (4.30) e integrando, temos que:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_{H_2O}}{\rho_{H_2O}} &= -k_{H_2O} dt \\ \int \frac{d\rho_{H_2O}}{\rho_{H_2O}} &= \int -k_{H_2O} dt \\ \ln\left(\frac{\rho_{H_2O}}{\rho_{H_2O i}}\right) &= -k_{H_2O} \Delta t \\ \rho_{H_2O} - \rho_{H_2O i} &= -e^{-k_{H_2O} \Delta t} \end{aligned}$$

Sendo assim, a solução analítica desse modelo pode ser expressa como na Eq. (4.31):

$$\rho_{H_2O} = \rho_{H_2O i} - e^{-k_{H_2O} \Delta t} \quad (4.31)$$

Com base na Eq. (4.31) vale ressaltar que $\ln(k_{H_2O}) = \ln(A) - \frac{E}{RT}$.

4.3.2 Modelo de equilíbrio térmico

Em Collazo et al., (2012), Peters et al., (2002), Yang et al., (2008), Morvan et al., (2009) e Porteiro et al., (2007) a taxa de evaporação é calculada por meio do modelo de equilíbrio térmico, cujo equacionamento é apresentado na Eq. (4.32):

$$\dot{\omega}_{\text{secagem},H_2O} = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{(T-T_{\text{evap}})\rho c_p}{\Delta H_{\text{evap}}\delta t} & \text{se } T \geq 100^\circ C \\ 0 & \text{se } T < 100^\circ C \end{array} \right\} \quad (4.32)$$

Onde ρ , c_p e ΔH_{evap} são densidade, calor específico e entalpia de evaporação da biomassa, respectivamente. O valor de ΔH_{evap} utilizado é de $-2,26 \times 10^6$ J/Kg.

Qualquer aumento de temperatura, acima da temperatura de evaporação, provoca evaporação de umidade e a taxa de evaporação é proporcional a quantidade de calor absorvida pela partícula. Para solucionar este tipo de equação diferencial será preciso realizar uma discretização, para tal será utilizado o método de diferenças finitas. Muitos autores utilizaram este método para solucionar equações similares a esta, entre estes, Purlis & Salvadori (2009), Balaban & Pigott (1988) e Cunha (2010). Vale ressaltar que o valor de ΔH_{evap} adotado é de $-2,26 \times 10^6$ J/Kg

4.3.3 Modelo convectivo

Em Di Blasi et al., (2008), Zhou et al., (2005), Larfeldt et al., (2000), Yang et al., (2007) e Shin et al., (2000) a secagem é modelada como um processo transferência de massa convectiva entre as fases sólida e gasosa. Neste modelo aqui referenciado como convectivo a taxa de evaporação é calculada a partir da relação apresentada na Eq. (4.33):

$$\dot{\omega}_{\text{secagem},H_2O} = -k_m S T (C_{w_s} - C_{w_g}) \quad (4.33)$$

Onde k_m é o coeficiente de transferência de massa (m/s), S é a área de superfície (m^2) ($S=S_T V_T$), C_{w_s} é a concentração de umidade na superfície da partícula que está prestes a evaporar, ou seja, vapor saturado (kg/m^3) e C_{w_g} é a concentração de vapor de água no gás presente na câmara de combustão (kg/m^3).

Considerando equilíbrio termodinâmico e ação do escoamento em meio poroso, na Eq. (4.34) é apresentado a equação para o cálculo da concentração da umidade na

superfície da partícula e na Eq. (4.35) a equação para o cálculo da massa superficial específica de saturação da água:

$$C_{w_s} = \varepsilon \rho_{SAT_{H_2O}} \quad (4.34)$$

$$\rho_{SAT_{H_2O}} = \frac{P_{SAT} M_{W_{H_2O}}}{R_u T_s} \quad (4.35)$$

Na qual $\rho_{SAT_{H_2O}}$ representa a massa específica de saturação da água, $M_{W_{H_2O}}$ o peso molecular da água e P_{SAT} a pressão de saturação. Segundo Reynolds (1979):

$$\ln\left(\frac{P_{SAT}}{P_c}\right) = \left(\frac{T_c}{T_s} - 1\right) \cdot \sum_{i=1}^8 F_i [a \cdot (T - T_p)]^{i-1} \quad (4.36)$$

Onde P_c é a pressão no ponto crítico cujo valor é 317,0 kg/m³. Os valores das constantes F_i e a são apresentados em Reynolds (1979).

A variável k_m pode ser estabelecida por meio de uma relação com o número de Schmidt (Sc) análogo ao número de Prandtl para transferência de calor, e o número Sherwood (Sh) análogo ao número de Nusselt. Os números de Schmidt e o número de Sherwood podem ser visualizados nas Eq. (4.37) e (4.38), respectivamente.

$$Sc = \frac{\mu_g}{\rho_g D_{AB}} \quad (4.37)$$

$$Sh = \frac{k_m d_p}{D_{AB}} \quad (4.38)$$

Na Equação (4.37) os termos μ_g , ρ_g e D_{AB} são, viscosidade dinâmica para a fase gasosa, densidade, massa específica da mistura de gases e coeficiente efetivo de difusão no seio da fase gasosa. Na Eq. (4.38) o termo d_p representa o diâmetro dos poros da partícula de biomassa.

Segundo Wakao & Kaguei (1982) é possível relacionar o número de Sherwood, com os números de Reynolds $\left(Re = \frac{\rho_g u_{darcy} d_p}{(1-\varepsilon)\mu_g}\right)$ e Schmidt, por meio da formulação apresentada na Eq. (4.39), na qual é ajustada pelo parâmetro C1 para adaptação da equação ao meio poroso (Spreutels *et al*, 2013):

$$Sh = (2 + Re^{0,6} Sc^{\frac{1}{3}}) \cdot C1 \quad (4.39)$$

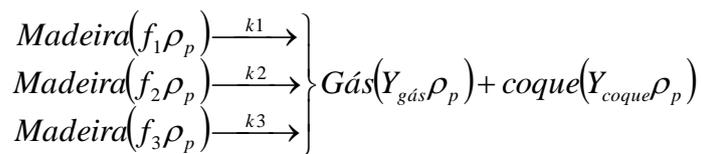
O parâmetro C1 utilizado foi de 0,001 e o mesmo foi estabelecido por tentativa e erro. Substituindo as Eq.(4.37) e (4.38) na Eq. (4.39), e isolando a variável k_m têm-se que:

$$k_m = \frac{D_{AB}}{d_p} \left[2 + \left(\frac{\rho_g u_{darcy} d_p}{(1-\varepsilon)\mu_g} \right)^{0,6} \left(\frac{\mu_g}{\rho_g D_{AB}} \right)^{1/3} \right] \cdot C1 \quad (4.40)$$

4.4 MODELO MATEMÁTICO DE PIRÓLISE

Gases tais como CO_2 , H_2 , CO , CH_4 , H_2O , etc, bem como alcatrão, são liberados para o ambiente decorrentes de reações e transformações no interior da partícula, etapa conhecida como pirólise. Quando parte da partícula reage com gases na atmosfera, inicia-se a etapa de gaseificação, se a atmosfera contiver oxigênio, o processo de gaseificação nada mais é do que combustão (Carrasco, 1993; Simmons, 1983; Porteiro *et al.*, 2007).

Estudos cinéticos de biomassa indicam que a interação entre os principais constituintes da biomassa (celulose, hemicelulose e lignina) não é tão significativa quanto à composição da biomassa. Por conta disso muitos pesquisadores, tais como Radmanesh *et al.* (2006), Órfão *et al.* (1999), Demirbas (2004), Hong Lu (2006), consideram o modelo de três reações paralelas independentes, chamado de modelo de superposição, como o melhor modelo cinético para descrever a pirólise da madeira em taxas de aquecimento moderadas. Este modelo será utilizado no presente trabalho e é apresentado nas equações (4.41) e (4.42).



$$\dot{\omega}_{pir} = \frac{d\rho_v}{dt} = -(f_1k_1 + f_2k_2 + f_3k_3)\rho_v \quad (4.41)$$

$$k_i = \left(A_i e^{-\frac{E_i}{RT}} \right), i = 1,2,3 \quad (4.42)$$

O termo $\dot{\omega}_{pir}$ representa a taxa de conversão de massa devido à pirólise. E ρ_v representa a massa específica do combustível seco, $Y_{gás}$ e Y_{coque} correspondem às frações de massa de gás e coque formados devido a pirólise, respectivamente. Já f_1 , f_2 e f_3 são as frações de massa de hemicelulose, celulose e lignina, respectivamente.

A Tabela 4.1 apresenta os parâmetros f_1 , f_2 e f_3 para o modelo de superposição, retirados de Beldereok (2007).

Tabela 4.1- Parâmetros para o modelo de superposição

Hemicelulose ($f_1 = 0,313$)		Celulose ($f_2 = 0,553$)		Lignina ($f_3 = 0,134$)	
$A_1(s^{-1})$	$E_1(J/mol)$	$A_2(s^{-1})$	$E_2(J/mol)$	$A_3(s^{-1})$	$E_3(J/mol)$
$4,9 \times 10^9$	$1,27 \times 10^5$	$1,9 \times 10^{11}$	$1,57 \times 10^5$	$2,7 \times 10^2$	$6,54 \times 10^4$

A Tabela 4.2 apresenta a composição dos voláteis emitidos pela particular. As frações de massa foram calculadas com base no trabalho de Thunman et al. (2004).

Tabela 4.2 - Composição dos gases voláteis provenientes da pirólise

Componentes	H ₂	CO	CO ₂	H ₂ O	CH ₄	C ₆ H ₆
Fração de massa (f _{pir,k})	0,09	0,26	0,10	0,14	0,04	0,37

Contando com os gases de pirólise, 8 espécies serão consideradas nas simulações: O₂ e N₂ (formam o ar em uma composição de 79% de N₂ e 21% de O₂) H₂O, H₂, CO, CO₂, CH₄, C₆H₆.

4.5 PROPRIEDADES TERMOFÍSICAS

4.5.1 Massa específica da mistura de gases

A equação de estado para gases ideais, Eq. (4.43), é utilizada para relacionar a massa específica da mistura de gás gerado, com a temperatura e pressão:

$$\rho_g = \frac{(p\overline{W}_g)}{(RT_g)} \quad (4.43)$$

Os termos p, R e T_g são, respectivamente, a pressão da mistura de gases, constante universal dos gases (8315 kmol⁻¹ · K⁻¹) e temperatura da mistura de gases. O peso molecular da mistura de gases é obtido a partir da composição dos gases (Eq. 4.44): $\overline{W}_g = (\sum_{k=1}^N Y_k/W_k)^{-1}$, onde Y_k e W_k são a fração de massa e o peso molecular de uma dada espécie k, respectivamente (Turns, 2004), assim:

$$\overline{W}_g = \left(\frac{Y_{O_2}}{W_{O_2}} + \frac{Y_{H_2O}}{W_{H_2O}} + \frac{Y_{N_2}}{W_{N_2}} + \frac{Y_{CO}}{W_{CO}} + \frac{Y_{CO_2}}{W_{CO_2}} + \frac{Y_{CH_4}}{W_{CH_4}} + \frac{Y_{C_6H_6}}{W_{C_6H_6}} + \frac{Y_{H_2}}{W_{H_2}} \right)^{-1} \quad (4.44)$$

4.5.2 Calor específico da mistura de gases

O calor específico da mistura de gás a uma pressão constante pode ser obtido a partir da Eq. (4.45) (Turns, 2004):

$$c_{p,g} = \sum_{k=1}^{N_{SP}} Y_k c_{p,k} = Y_{O_2} c_{p,O_2} + Y_{H_2O} c_{p,H_2O} + Y_{N_2} c_{p,N_2} + \dots + Y_{C_6H_6} c_{p,C_6H_6} \quad (4.45)$$

Na equação (3.27) o índice 'k' representa as espécies consideradas no trabalho (O₂, H₂O, N₂, H₂, CO, CO₂, CH₄, C₆H₆), sendo demonstrados os termos iniciais da iteração e o

termo final. O calor específico de uma única espécie ‘ k ’ é calculado como uma função da temperatura. Os coeficientes ($c_{p,k}$) da Eq. (4.45) para as espécies trabalho O₂, H₂O, N₂, H₂, CO, CO₂ e CH₄ foram obtidos a partir de um arquivo de dados termoquímicos usados como coeficientes polinomiais da NASA (Nasa, 2013). Os valores das constantes para o coeficiente do benzeno (C₆H₆) foram tirados do manual do Fluent 2006.

$$c_{p,k} = a + bT_g + cT_g^2 + dT_g^3 + eT_g^4 \quad (4.46)$$

$$c_{p,O_2} = 3,78 - 2,96 \cdot 10^{-3}T_g + 9,85 \cdot 10^{-6}T_g^2 - 9,68 \cdot 10^{-9}T_g^3 + 3,24 \cdot 10^{-12}T_g^4 \quad (4.47)$$

$$c_{p,H_2O} = 4,19 - 2,03 \cdot 10^{-3}T_g + 6,52 \cdot 10^{-6}T_g^2 - 5,49 \cdot 10^{-9}T_g^3 + 1,77 \cdot 10^{-12}T_g^4 \quad (4.48)$$

$$c_{p,N_2} = 3,29 + 0,14 \cdot 10^{-2}T_g - 3,96 \cdot 10^{-2}T_g^2 + 5,64 \cdot 10^{-5}T_g^3 - 2,44 \cdot 10^{-8}T_g^4 \quad (4.49)$$

$$c_{p,H_2} = 2,34 + 7,98 \cdot 10^{-3}T_g - 1,95 \cdot 10^{-5}T_g^2 + 2,02 \cdot 10^{-8}T_g^3 - 7,37 \cdot 10^{-12}T_g^4 \quad (4.50)$$

$$c_{p,CO} = 3,58 - 6,1 \cdot 10^{-4}T_g + 1,01 \cdot 10^{-6}T_g^2 + 9,07 \cdot 10^{-10}T_g^3 - 9,04 \cdot 10^{-13}T_g^4 \quad (4.51)$$

$$c_{p,CO_2} = 2,35 + 8,98 \cdot 10^{-3}T_g - 7,12 \cdot 10^{-6}T_g^2 + 2,46 \cdot 10^{-9}T_g^3 - 1,44 \cdot 10^{-13}T_g^4 \quad (4.52)$$

$$c_{p,CH_4} = 5,15 - 1,37 \cdot 10^{-2}T_g + 4,92 \cdot 10^{-5}T_g^2 - 4,85 \cdot 10^{-8}T_g^3 + 1,67 \cdot 10^{-11}T_g^4 \quad (4.53)$$

$$c_{p,C_6H_6} = -3,13 + 4,72 \cdot 10^{-2}T_g - 2,91 \cdot 10^{-6}T_g^2 - 3,27 \cdot 10^{-8}T_g^3 + 1,72 \cdot 10^{-11}T_g^4 \quad (4.54)$$

Sendo T_g a temperatura do gás.

4.5.3 Viscosidade e condutividade térmica da mistura de gases

A viscosidade, μ_g , calculada pela Eq. (4.55) e a condutividade térmica, k_g , calculada pela eq. (4.56) da mistura de gases serão calculadas com base nos componentes puros da mistura, sendo N_{sp} o número de espécies modeladas (O₂, H₂O, N₂, H₂, CO, CO₂, CH₄, C₆H₆) (Bird *et al.*, 2001):

$$\mu_g = \frac{\sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k \mu_k}{\sum_{j=1}^{N_{sp}} Y_j \theta_{O_2j}} = \frac{Y_{O_2} \mu_{O_2}}{\sum_{j=1}^{N_{sp}} Y_j \theta_{O_2j}} + \frac{Y_{H_2O} \mu_{H_2O}}{\sum_{j=1}^{N_{sp}} Y_j \theta_{H_2Oj}} + \frac{Y_{N_2} \mu_{N_2}}{\sum_{j=1}^{N_{sp}} Y_j \theta_{N_2j}} + \dots + \frac{Y_{C_6H_6} \mu_{C_6H_6}}{\sum_{j=1}^{N_{sp}} Y_j \theta_{C_6H_6j}} \quad (4.55)$$

$$k_g = \frac{\sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k k_k}{\sum_{j=1}^{N_{sp}} Y_j \theta_{O_2j}} = \frac{Y_{O_2} k_{O_2}}{\sum_{j=1}^{N_{sp}} Y_j \theta_{O_2j}} + \frac{Y_{H_2O} k_{H_2O}}{\sum_{j=1}^{N_{sp}} Y_j \theta_{H_2Oj}} + \frac{Y_{N_2} k_{N_2}}{\sum_{j=1}^{N_{sp}} Y_j \theta_{N_2j}} + \dots + \frac{Y_{C_6H_6} k_{C_6H_6}}{\sum_{j=1}^{N_{sp}} Y_j \theta_{C_6H_6j}} \quad (4.56)$$

Nas Equações (4.55) e (4.56) o índice ‘k’ representa as espécies consideradas no trabalho (O₂, H₂O, N₂, H₂, CO, CO₂, CH₄, C₆H₆), sendo demonstrado os termos iniciais da iteração e o termo final. Os valores de θ_{kj} , das viscosidades e condutividades térmicas dos componentes puros foram calculados a partir de Bird et al. (2001), apresentada na Eq. (4.57):

$$\theta_{kj} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{W_{g,k}}{W_{g,j}} \right)^{\frac{1}{2}} \left[1 + \sqrt{\frac{\mu_k}{\mu_j}} \left(\frac{W_{g,j}}{W_{g,k}} \right)^{\frac{1}{4}} \right]^2 \quad (4.57)$$

Os termos $W_{g,k}$ e $W_{g,j}$ representam o peso molecular da espécie gasosa k e j , respectivamente, e os termos μ_k e μ_j a viscosidade do componente puro k e j , respectivamente.

4.5.4 Coeficiente efetivo de difusão de gases

Sabe-se que a difusão no interior da fase gasosa e a difusão de Knudsen podem contribuir para o transporte de massa dentro da estrutura porosa (Bird et al., 2001). O efeito combinado dos dois mecanismos de difusão descritos pode ser condensando em um coeficiente de difusão efetivo, $D_{k,eff}$. Segundo Cremasco (2002), os coeficientes de difusão efetivos podem ser expressos para cada uma das oito espécies químicas consideradas como apresentado nas Eq. (4.58) a (4.65):

$$\frac{1}{D_{O_2,eff}} = \frac{\tau}{\varepsilon} \left(\frac{1}{D_{m,O_2}} + \frac{1}{D_{K,O_2}} \right) \quad (4.58)$$

$$\frac{1}{D_{H_2O,eff}} = \frac{\tau}{\varepsilon} \left(\frac{1}{D_{m,H_2O}} + \frac{1}{D_{K,H_2O}} \right) \quad (4.59)$$

$$\frac{1}{D_{N_2,eff}} = \frac{\tau}{\varepsilon} \left(\frac{1}{D_{m,N_2}} + \frac{1}{D_{K,N_2}} \right) \quad (4.60)$$

$$\frac{1}{D_{H_2,eff}} = \frac{\tau}{\varepsilon} \left(\frac{1}{D_{m,H_2}} + \frac{1}{D_{K,H_2}} \right) \quad (4.61)$$

$$\frac{1}{D_{CO,eff}} = \frac{\tau}{\varepsilon} \left(\frac{1}{D_{m,CO}} + \frac{1}{D_{K,CO}} \right) \quad (4.62)$$

$$\frac{1}{D_{CO_2,eff}} = \frac{\tau}{\varepsilon} \left(\frac{1}{D_{m,CO_2}} + \frac{1}{D_{K,CO_2}} \right) \quad (4.63)$$

$$\frac{1}{D_{CH_4,eff}} = \frac{\tau}{\varepsilon} \left(\frac{1}{D_{m,CH_4}} + \frac{1}{D_{K,CH_4}} \right) \quad (4.64)$$

$$\frac{1}{D_{C_6H_6,eff}} = \frac{\tau}{\varepsilon} \left(\frac{1}{D_{m,C_6H_6}} + \frac{1}{D_{K,C_6H_6}} \right) \quad (4.65)$$

Onde: $D_{m,k}$ representa o coeficiente de difusão no seio da fase gasosa e $D_{K,k}$ é o coeficiente de difusão de Knudsen. O termo τ representa a tortuosidade, que contabiliza o efeito do caminho tortuoso do gás na matriz sólida.

Segundo Turns (2004) o coeficiente de difusão no seio da fase gasosa, para um componente k da mistura, pode ser calculado a partir da Eq. (4.66):

$$D_{m,k} = (1 - X_k) \left(\sum_{\substack{j=2 \\ j \neq k}}^{N_{sp}} \frac{X_j}{D_{kj}} \right)^{-1} \quad (4.66)$$

O termo X_k representa a fração molar da espécie k e o índice j presente na eq. (4.66) representa as demais espécies presentes na mistura, o termo D_{kj} será calculado pela equação de Chapman-Enskog, expressa pelas Eq. (4.67) a (4.74) (Bird *et al.*, 2001):

$$D_{O_2j} = 1,858 \times 10^{-3} \frac{T_g^{3/2}}{p \sigma_{O_2j}^2 \Omega_D} \left(\frac{1}{W_{g,O_2}} + \frac{1}{W_{g,j}} \right) \quad (4.67)$$

$$D_{H_2Oj} = 1,858 \times 10^{-3} \frac{T_g^{3/2}}{p \sigma_{H_2Oj}^2 \Omega_D} \left(\frac{1}{W_{g,H_2O}} + \frac{1}{W_{g,j}} \right) \quad (4.68)$$

$$D_{N_2j} = 1,858 \times 10^{-3} \frac{T_g^{3/2}}{p \sigma_{N_2j}^2 \Omega_D} \left(\frac{1}{W_{g,N_2}} + \frac{1}{W_{g,j}} \right) \quad (4.69)$$

$$D_{H_2j} = 1,858 \times 10^{-3} \frac{T_g^{3/2}}{p \sigma_{H_2j}^2 \Omega_D} \left(\frac{1}{W_{g,H_2}} + \frac{1}{W_{g,j}} \right) \quad (4.70)$$

$$D_{COj} = 1,858 \times 10^{-3} \frac{T_g^{3/2}}{p \sigma_{COj}^2 \Omega_D} \left(\frac{1}{W_{g,CO}} + \frac{1}{W_{g,j}} \right) \quad (4.71)$$

$$D_{CO_2j} = 1,858 \times 10^{-3} \frac{T_g^{3/2}}{p \sigma_{CO_2j}^2 \Omega_D} \left(\frac{1}{W_{g,CO_2}} + \frac{1}{W_{g,j}} \right) \quad (4.72)$$

$$D_{CH_4j} = 1,858 \times 10^{-3} \frac{T_g^{3/2}}{p \sigma_{CH_4j}^2 \Omega_D} \left(\frac{1}{W_{g,CH_4}} + \frac{1}{W_{g,j}} \right) \quad (4.73)$$

$$D_{C_6H_6,j} = 1,858 \times 10^{-3} \frac{T_g^{3/2}}{p \sigma_{C_6H_6,j}^2 \Omega_D} \left(\frac{1}{W_{g,C_6H_6}} + \frac{1}{W_{g,j}} \right) \quad (4.74)$$

Onde: $\sigma_{kj} = (\sigma_k + \sigma_j)/2$ (índice ‘k’ representa as espécies O₂, H₂O, N₂, H₂, CO, CO₂, CH₄, C₆H₆) é função da energia potencial de atração/repulsão entre duas moléculas, seu valor será tomado da literatura, sendo os diâmetros de colisão σ_k e σ_j , dado em Å. Os termos $W_{g,k}$ e $W_{g,j}$ representam os pesos moleculares das espécies gasosas k e j em (kg kmol⁻¹), respectivamente. O termo T_g é a temperatura do gás em K, p é a pressão termodinâmica ou hidráulica (Pa) e Ω_D é a integral de colisão para gases apolares para a difusividade (Bird *et al.*, 2001).

O coeficiente de difusão Knudsen será calculado para cada espécie química por meio das Eq. (4.75) a (4.82) (Cremasco, 2002):

$$D_{K,O_2} = \frac{d_p}{3} u_{m,O_2} \quad (4.75)$$

$$D_{K,H_2O} = \frac{d_p}{3} u_{m,H_2O} \quad (4.76)$$

$$D_{K,N_2} = \frac{d_p}{3} u_{m,N_2} \quad (4.77)$$

$$D_{K,CO} = \frac{d_p}{3} u_{m,CO} \quad (4.78)$$

$$D_{K,CO_2} = \frac{d_p}{3} u_{m,CO_2} \quad (4.79)$$

$$D_{K,CH_4} = \frac{d_p}{3} u_{m,CH_4} \quad (4.80)$$

$$D_{K,H_2} = \frac{d_p}{3} u_{m,H_2} \quad (4.81)$$

$$D_{K,C_6H_6} = \frac{d_p}{3} u_{m,C_6H_6} \quad (4.82)$$

Onde d_p é o diâmetro médio dos poros e $u_{m,k}$ é a velocidade média das moléculas de uma espécie k nos poros. As $u_{m,k}$ podem ser calculadas como (Cremasco, 2002): $u_{m,k} = [(8RT_g)/(\pi W_{g,k})]^{0,5}$. A porosidade, ε , é introduzida de modo que o fluxo de gases seja baseado na seção transversal local total do sólido. A tortuosidade, τ , contabiliza o efeito do caminho tortuoso do gás na matriz sólida.

4.5.5 Condutividade térmica do material sólido

A condutividade térmica do material sólido será calculada como apresentado na Eq. (4.83) (Cunha, 2010):

$$k_s = \eta_u k_u + \eta_{cs} k_{cs} + \eta_{cinza} k_{cinza} \quad (4.83)$$

Onde k_u , k_{cs} e k_{cinza} são as condutividades da umidade, do combustível sólido seco e da cinza, respectivamente. E $\eta_u = m_u/m_s$, $\eta_{cs} = m_{cs}/m_s$ e $\eta_{cinza} = m_{cinza}/m_s$, onde m_s , m_u , m_{cs} e m_{cinza} são as massas de sólido, de umidade, de combustível sólido seco e de cinzas, respectivamente. Adicionalmente $m_s = m_u + m_{cs} + m_{cinza}$, $k_{cinza} = 6,18 \times 10^{-4}T + 1,2$ e $k_u = -0,487 + 5,887 \times 10^{-3}T - 7,38 \times 10^{-6}T^2$.

Segundo Atkinson & Merrick (1983) a condutividade térmica da biomassa seca, k_{cs} , muda de forma independente com a temperatura e composição, uma correlação desses dados pode ser expressa como na Eq. (4.84):

$$k_{cs} = (\rho_r/4511)^{3,5} T_g^{0,5} \quad (4.84)$$

A biomassa geralmente queima em altas temperaturas, onde o aquecimento devido à transferência radiativa pode ser muito importante. O efeito da transferência de calor radiativa pode ser contabilizado na equação da energia do sólido por meio do aumento de sua condutividade, por uma condutividade radiativa, mostrada na Eq. (4.85):

$$k_{rad} = 4\sigma \varepsilon_{rad} d_p T_s^4 \quad (4.85)$$

Onde σ é a constante de Stefan-Boltzmann, d_p é o tamanho dos poros e ε_{rad} é a emissividade radiativa.

4.5.6 Calor específico do material sólido

O calor específico do sólido considerando o efeito da cinza e da umidade será contabilizado pela Eq. (4.86) (Cunha, 2010):

$$c_{p,s} = \eta_u c_{p,u} + \eta_{cs} c_{p,cs} + \eta_{cinza} c_{p,cinza} \quad (4.86)$$

Onde $c_{p,u}$, $c_{p,cs}$ e $c_{p,cinza}$ são os calores específicos da umidade, do combustível sólido seco e da cinza, respectivamente. Os calores específicos da cinza e da umidade serão calculados por meio das equações, $c_{p,cinza} = 593,3 + 0,586T_s$ e $c_{p,u} = 4182 + 0,36(T_s - 273)$, respectivamente.

Devido a complexa estrutura da biomassa, Atkinson & Merrick (1983) propõe um modelo para o calor específico do combustível sólido seco, em base seca e isento de cinzas, por uma distribuição característica de temperaturas, assim o modelo proposto para $c_{p,cs}$ será apresentado na Eq. (4.86):

$$c_{p,cs} = (R/\overline{W}_s)[g_1(380T_s^{-1}) + 2g_1(1800T_s^{-1})] \quad (4.87)$$

Onde $g_1(X) = (X^2 e^X)(e^X - 1)^{-2}$ e o parâmetro \overline{W}_s representa o peso atômico médio do sólido, calculado por meio da Eq. (4.88):

$$1/\overline{W}_s = \sum_{k=1}^5 Y_k/W_{s,k} = \frac{Y_C}{W_{s,C}} + \frac{Y_H}{W_{s,H}} + \frac{Y_N}{W_{s,N}} + \frac{Y_O}{W_{s,O}} + \frac{Y_S}{W_{s,S}} \quad (4.88)$$

Sendo Y_k as frações de massa das espécies carbono (C), hidrogênio (H), oxigênio (O), nitrogênio (N) e enxofre (S), em base seca, e $W_{s,k}$ são os respectivos pesos atômicos dos elementos.

4.5.7 Permeabilidade

A permeabilidade (propriedade de associada à capacidade de transmitir fluidos) será calculada em função dos diâmetros dos poros (d_p) e da porosidade (ε), a partir da relação de Carman-Kozeny apresentada na Eq. (4.89)(Krishna & Wesselingh, 1996):

$$K = (d_p^2/80)[\varepsilon^2/(1 - \varepsilon)^2] \quad (4.89)$$

5. DETALHES DA SIMULAÇÃO

5.1 PRÉ-PROCESSAMENTO: GEOMETRIA E CONDIÇÕES DE CONTORNO

As partículas consideradas nas simulações são todas axissimétricas. A Figura (5.1) mostra uma amostra real de biomassa em formato cilíndrico, mesmo formato a ser considerado para simulação no presente trabalho. A Fig. (5.2) mostra uma visão geral do ambiente simulado, onde um tronco de madeira como o mostrado na Fig. (5.1) está localizado no centro de uma câmara de aquecimento cilíndrica por meio de uma haste de fixa em uma balança. Uma entrada de gás foi localizada no fundo da câmara permitindo a introdução de N_2 à alta temperatura, o gás escapa por meio de uma saída superior. O campo inicial de espécies é de 0% de O_2 e 100% de N_2 em todo o domínio, ou seja, atmosfera de nitrogênio puro, para que a princípio evitasse a combustão da partícula. A Figura (5.3) mostra uma visão geral da partícula e do meio envolvente.

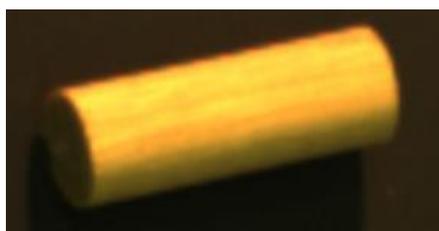


Figura 5. 1 - Amostra de madeira isolada tirada do trabalho de Hong Lu (2006).

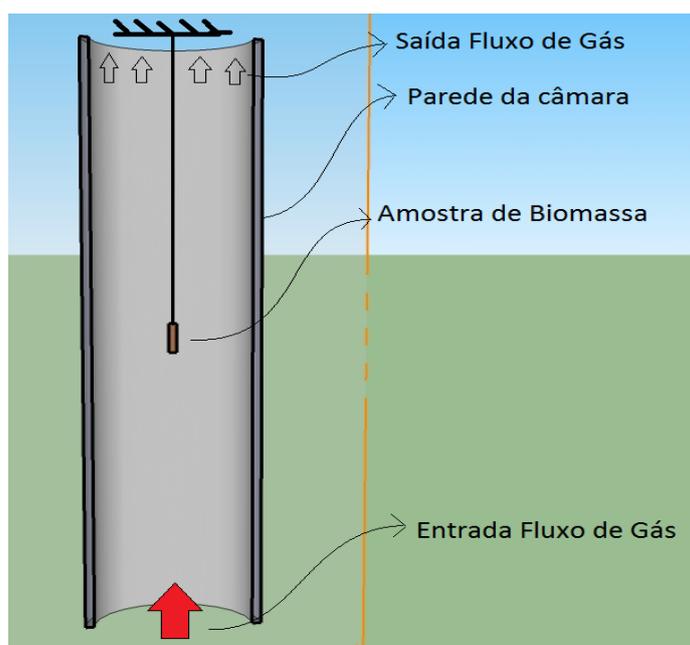


Figura 5.2 - Domínio computacional

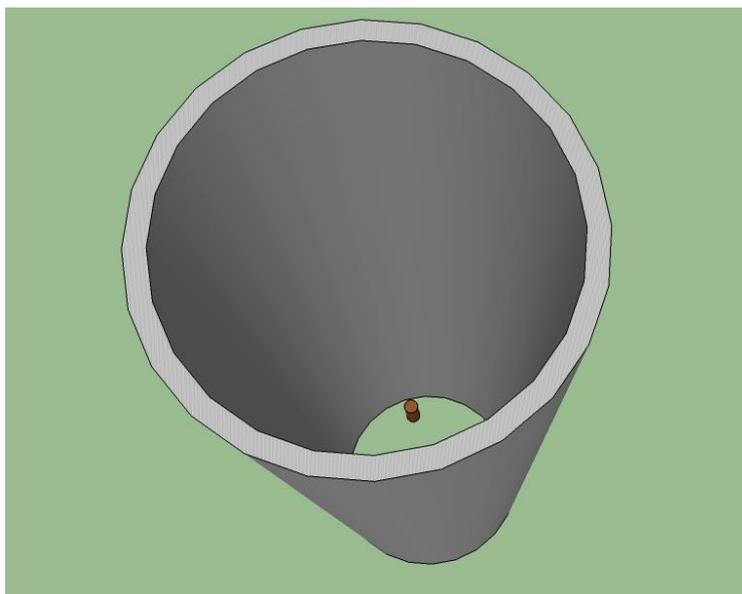


Figura 5.3 - Domínio computacional: vista em perspectiva

Na Figura (5.4) é apresentado o perfil bidimensional da geometria da simulação e informações como o eixo de rotação z . As dimensões do domínio foram estabelecidas a partir de informações dadas no trabalho de Hong Lu (2006). As condições de contorno e iniciais dos casos de secagem são ajustadas conforme apresentado na Fig (5.4) e Tab. (5.1). Na Fig. (5.4) também é possível visualizar os pontos determinados para medição da temperatura na partícula.

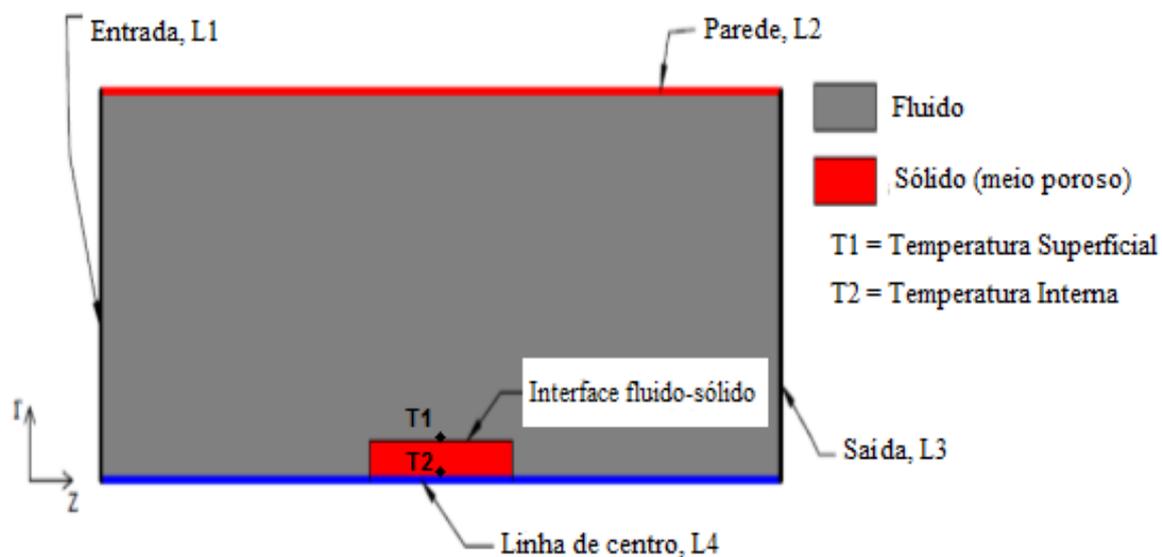


Figura 5.4 - Perfil bidimensional axissimétrico em coordenadas cilíndricas utilizado nas simulações.

Tabela 5.1 – Condições de contorno, CC, e condições iniciais, CI.

CI	$t = 0$	$\forall z \wedge \forall r *$	$u = u_{in}$	$v = 0$	$\phi = \phi_{in}$
CC	L1	$\forall t$	$u = u_{in}$	$v = 0$	$\phi = \phi_{in}$
CC	L2	$\forall t$	$u = 0$	$v = 0$	$\phi = \phi_{in}$
CC	L3	$\forall t$	$\partial u / \partial z = 0$	$\partial v / \partial z = 0$	$\partial \phi / \partial z = 0$
CC	L4	$\forall t$	$\partial u / \partial r = 0$	$v = 0$	$\partial \phi / \partial r = 0$

*domínio fluido.

As condições de contorno em L1 e L2 não mudam com o tempo. Já as condições de saída (L3) e simetria (L4) são transientes. As condições de contorno aplicadas em L1 são: fluxo de massa somente na direção z, temperatura e composição de espécies químicas prescritas e fixas. As condições de contorno para L2 são: condição de não deslizamento (velocidade nula no contorno), temperatura e espécies químicas prescritas e fixas.

A condição de contorno aplicada em L4 é a de simetria, que é expressa por meio de derivadas nulas para os campos de espécies químicas, campo de temperaturas e componente z de velocidade. Adicionalmente v deve ser igual a zero na linha de simetria para que a condição de simetria seja satisfeita para este contorno. Finalmente considera-se que os valores dos campos não mudam significativamente com a direção z na região de saída do domínio, assim as derivadas em L3 podem ser postas nulas.

O termo ϕ representa as espécies químicas ou a temperatura. As condições iniciais são impostas no instante $t=0$.

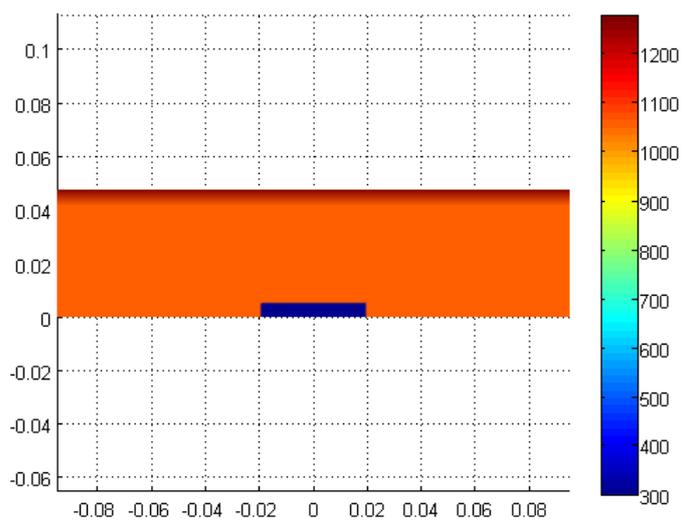
A temperatura do gás de secagem foi ajustada igual a 1073K na entrada do domínio. A temperatura da parede do reator foi posta igual a 1276K. A velocidade de entrada dos gases foi calculada de modo que o número de Reynolds fosse igual a 50, baseado no diâmetro do cilindro.

5.2 CONDIÇÕES INICIAIS

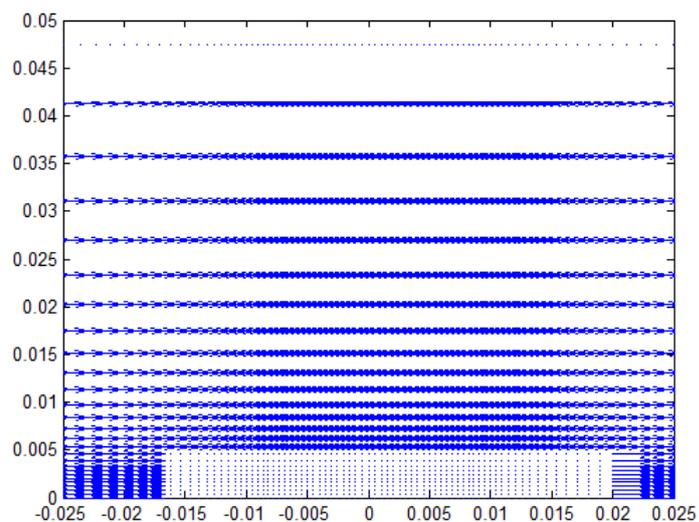
Neste tópico serão apresentados alguns campos iniciais utilizados nas simulações.

A Figura (5.5a) apresenta o campo de temperaturas iniciais, a Fig. (5.5b) o campo de velocidades iniciais e a Fig. (5.5c) mostra o campo de porosidade inicial.

(a)



(b)



(c)

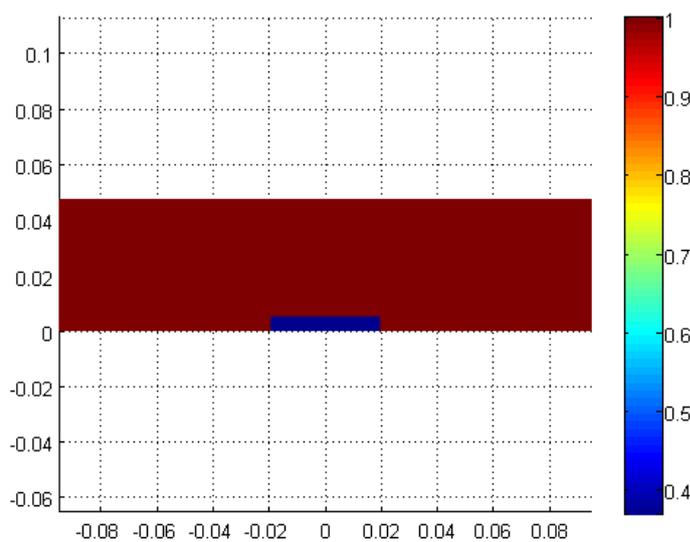


Figura 5.5 – (a) Campo de temperatura inicial, (b) campo de velocidades inicial e (c) campo de porosidade inicial.

Para o meio poroso as velocidades foram postas nulas, Fig. (5.5b), e a temperatura foi posta igual 298K, Fig. (5.5c). A temperatura da parede do reator foi posta igual a 1276 K. Para esta simulação foi considerada atmosfera de nitrogênio puro (sendo esta condição de contorno permanente), ou seja, o campo inicial de espécies é de 100% de N₂ em todo o domínio (meio fluido + meio poroso), para que se evitasse a combustão da partícula, pois o objetivo do trabalho é simular a secagem em elevadas temperaturas, porém, em ambientes inertes.

5.3 SENSIBILIDADE DE MALHA

A malha de elementos finitos tem por objetivo discretizar um determinado domínio de interesse em subdomínios. A discretização consiste em um conjunto de nós (pontos com coordenadas) e elementos finitos, com uma topologia pré-definida (triângulos ou quadriláteros, por exemplo). A malha de elementos finitos é o espaço em que as equações modeladas irão ser resolvidas, sendo que esta exerce um papel crucial com respeito à modelagem proposta neste trabalho.

O refinamento da malha pode influenciar os resultados numéricos na predição da taxa de evaporação, dos perfis de temperatura e outras. É importante destacar que a malha de volumes finitos deve ser suficientemente refinada ao ponto de identificar as características do problema simulado sem a necessidade de tempo de processamento demasiado. Para evitar possíveis desvios dos resultados devido o refinamento da malha surge à necessidade de realizar o teste de sensibilidade de malha.

O objetivo do teste de sensibilidade da malha é investigar a independência dos resultados em função do refinamento da malha.

5.3.1 Independência de malha espacial

Para o teste de sensibilidade foram criadas três malhas no software GAMBIT 2.4.6 cujas especificações são apresentadas na Tab. (5.2), estas possuem diferentes resoluções. Nesta parte foram empregados um passo de tempo de $\Delta t = 0,01s$ e modelo cinético. Utilizou-se uma versão adaptada do código de dinâmica dos fluidos computacional em MATLAB desenvolvido em Cunha (2010). O computador utilizado para o teste de sensibilidade espacial possui um processador INTEL CORE 2 DUO, 2,93 GHz, 3,25 GB RAM e sistema operacional XP, a versão do MATLAB foi a 8.0.0.783, R2012b.

Tabela 5.2 - Propriedades das malhas para teste de sensibilidade espacial.

	Definição	Nós	Elementos
Malha 1	Fina	12827	25152
Malha 2	Intermediária	5239	9440
Malha 3	Grossa	2567	4912

Nas Figuras (5.6), (5.7) e (5.8) pode-se visualizar a Malha 1 (fina), Malha 2 (Intermediária) e Malha 3 (Grossa), respectivamente. Nas figuras não é apresentado o domínio completo, somente uma parte do domínio próxima da partícula. É possível visualizar que houve uma preocupação maior no refinamento da malha na partícula (região em destaque) e na área próxima da partícula, já que essas são as regiões de maior gradiente de temperatura, de espécies e velocidade.

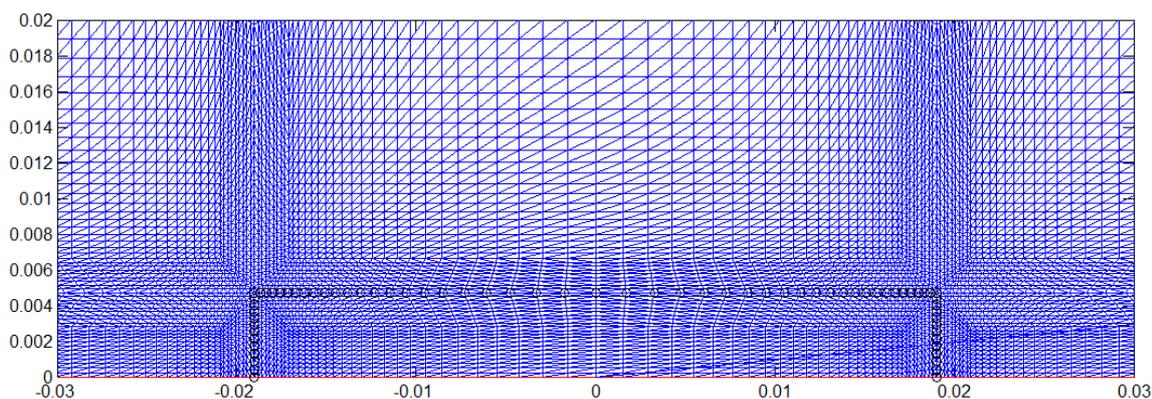


Figura 5.6 – Malha 1: Fina

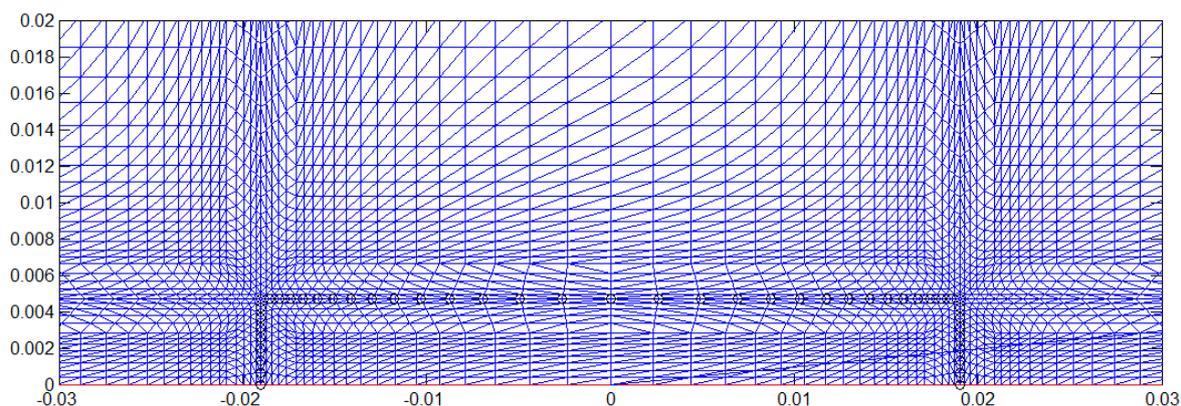


Figura 5.7 – Malha2: Intermediária

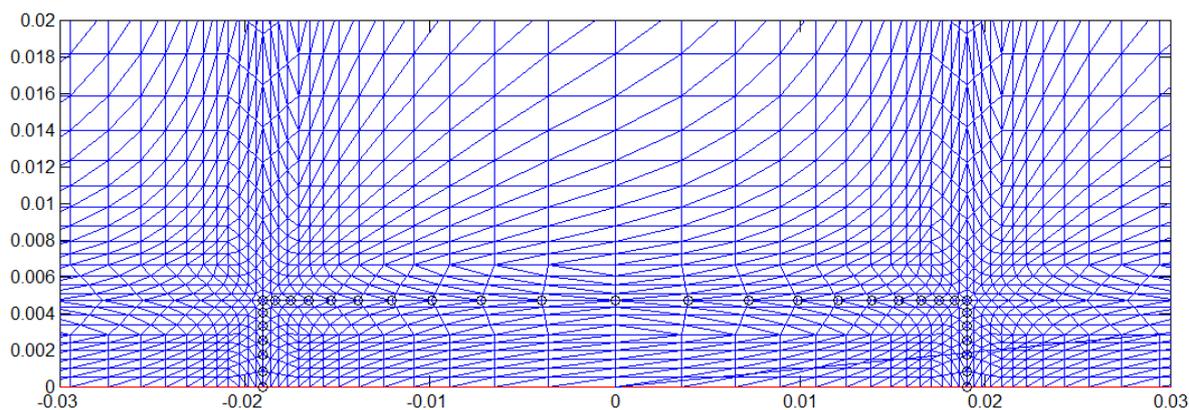


Figura 5.8 – Malha 3: Grossa

Para analisar a dependência dos resultados com o refinamento das malhas, são apresentadas as Figuras (5.9), (5.10) e (5.11). Estas foram realizadas com base nas condições de contorno mencionadas no item 5.1 do presente trabalho.

Na Figura (5.9) é apresentada a curva de conversão da biomassa úmida. São apresentadas curvas para as três malhas mencionadas anteriormente. Observa-se que na medida em que se aumenta o número de nós (refinamento), as curvas de perda de massa quase não se modificam. O que mostra que mesmo a malha mais grossa já apresenta bons resultados nesse caso.

Na Figura (5.10) é exibida a curva de temperatura média da superfície da partícula durante o processo de secagem. São apresentadas curvas para as três malhas mencionadas anteriormente. As formas dos perfis de temperatura para as três malhas são bem próximos, porém verifica-se uma melhor similaridade para a malha intermediária e para a malha fina, e ambas as curvas oscilam com o tempo menos que a malha grossa.

Na Figura (5.11) mostra-se a curva de temperatura no interior da partícula durante o processo de secagem. Assim como no gráfico da Fig. (5.10) verifica-se que as três curvas são bem próximas, porém verifica-se que a curva da malha grossa no final do processo de secagem, entre 70 e 95 segundos, se difere das curvas das malhas fina e intermediária.

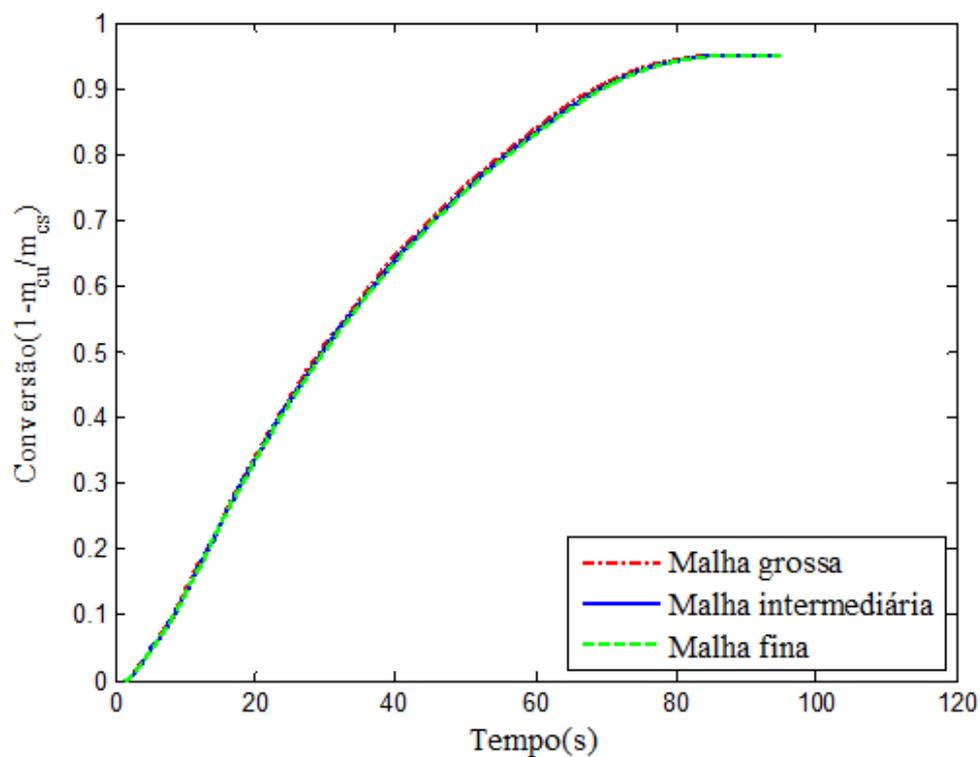


Figura 5.9 – Conversão de massa: teste espacial de malha

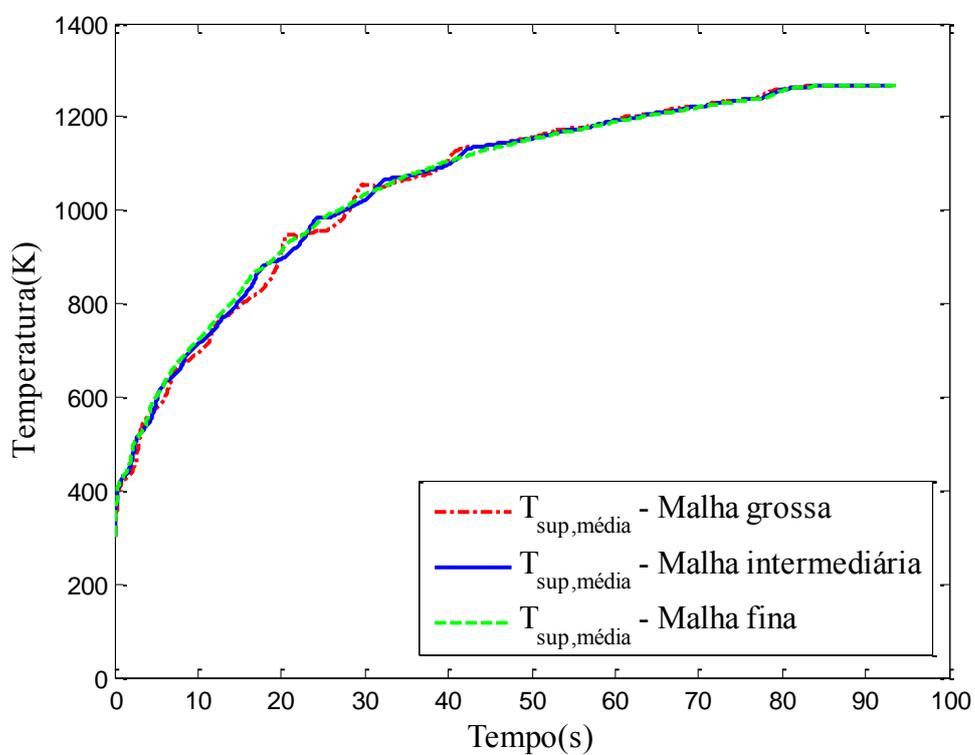


Figura 5.10 - Temperatura superficial média da partícula: teste espacial de malha

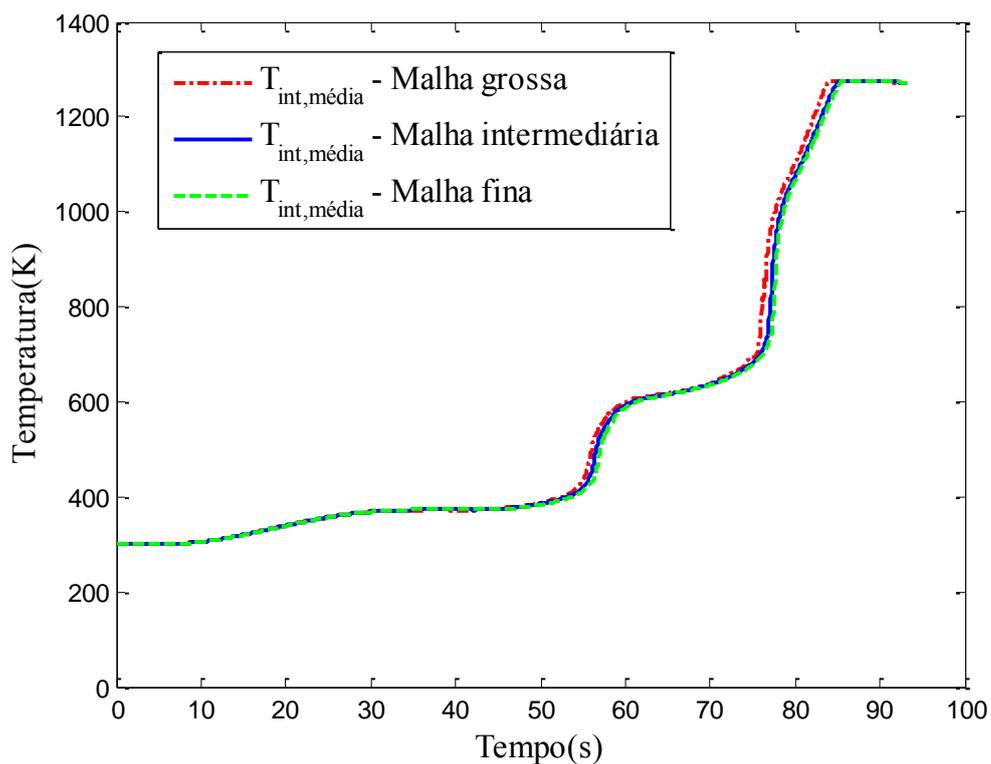


Figura 5.11 – Temperatura no interior da partícula: teste espacial de malha

O tempo de CPU gasto nas simulações, em horas, versus número de nós da malha é apresentado na Fig. (5.12). Na medida em que se aumenta o número de nós da malha, o tempo computacional aumenta demasiadamente. Como os tempos de CPU são altos é necessário levar em consideração tais tempos para a escolha de uma das malhas.

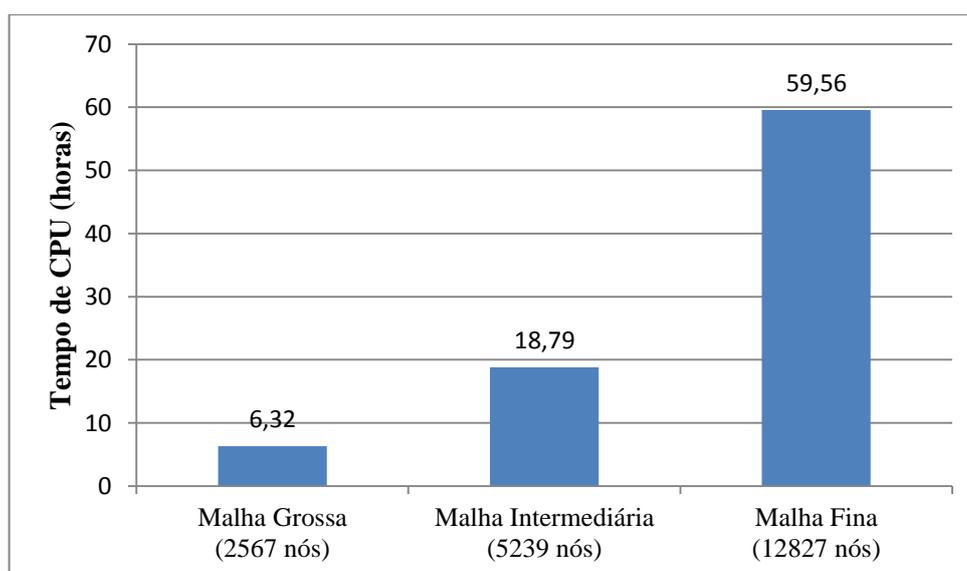


Figura 5.12 – Tempo de CPU gasto nas simulações do teste de sensibilidade espacial

Com base no exposto conclui-se que a malha intermediária apresenta resultados pouco afetados pela malha, podendo ela ser utilizada para uma análise segura dos fenômenos associados à secagem, uma vez que os resultados são similares dos obtidos com a malha mais refinada e o tempo computacional é bem inferior ao da malha fina.

5.3.2 Independência de malha temporal

Também é necessário verificar a influência da malha temporal sobre os resultados. Nesta análise escolheram-se três passos de tempo $\Delta t = 0,05s$ (passo grande), $\Delta t = 0,01s$ (passo médio) e $\Delta t = 0,002s$ (passo pequeno). Estes passos de tempo foram testados simulando o caso de secagem de partícula utilizando o modelo cinético e a malha intermediária, melhor escolha geométrica para a solução. O computador utilizado para o teste de sensibilidade temporal foi o mesmo para o teste de sensibilidade espacial.

Para analisar a dependência dos resultados com o passo de tempo adotado, são apresentadas as Figuras (5.13), (5.14) e (5.15).

Na Figura (5.13) é apresentada a curva de conversão de massa de biomassa úmida. São apresentadas curvas para os três passos de tempo e observa-se que estas são muito similares. Porém verifica-se por meio da ampliação das curvas que há uma melhor convergência entre os passos de tempo médio e pequeno.

Nas Figuras (5.14) e (5.15) são apresentadas as curvas de temperatura média da superfície da partícula e temperatura no interior da partícula, durante o processo de secagem. As formas dos perfis de temperatura para os três passos de tempo são bem próximos, porém verifica-se uma melhor similaridade para os passos de tempo médio e pequeno, quando analisada mais criteriosamente as curvas.

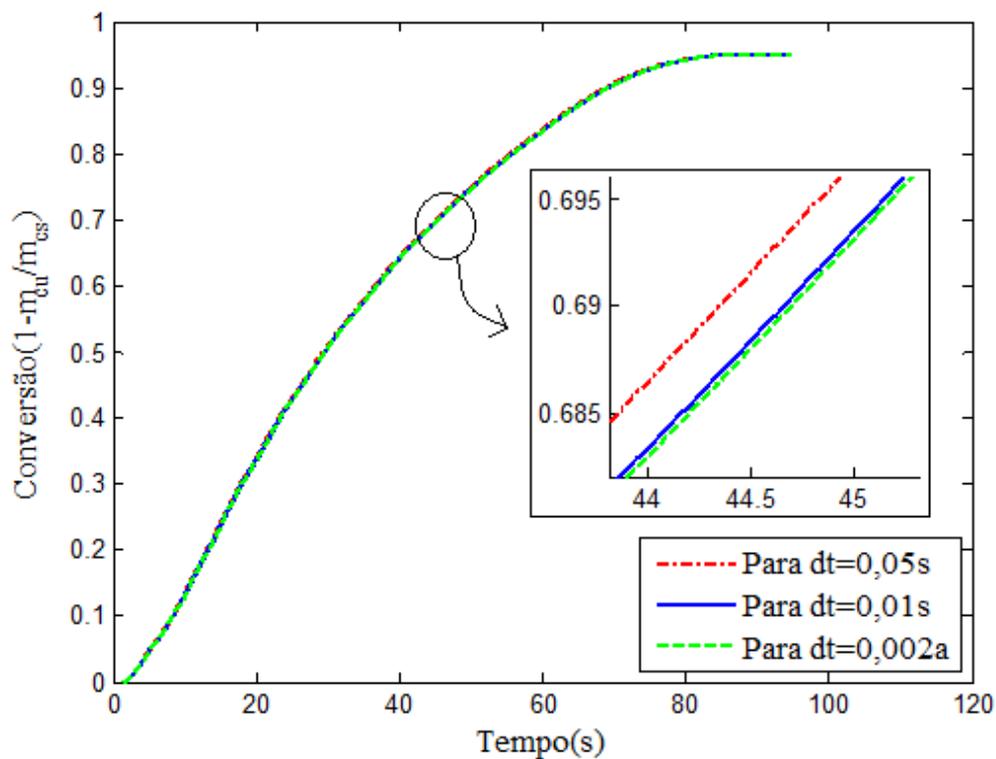


Figura 5.13 - Conversão de massa teste: teste temporal de malha

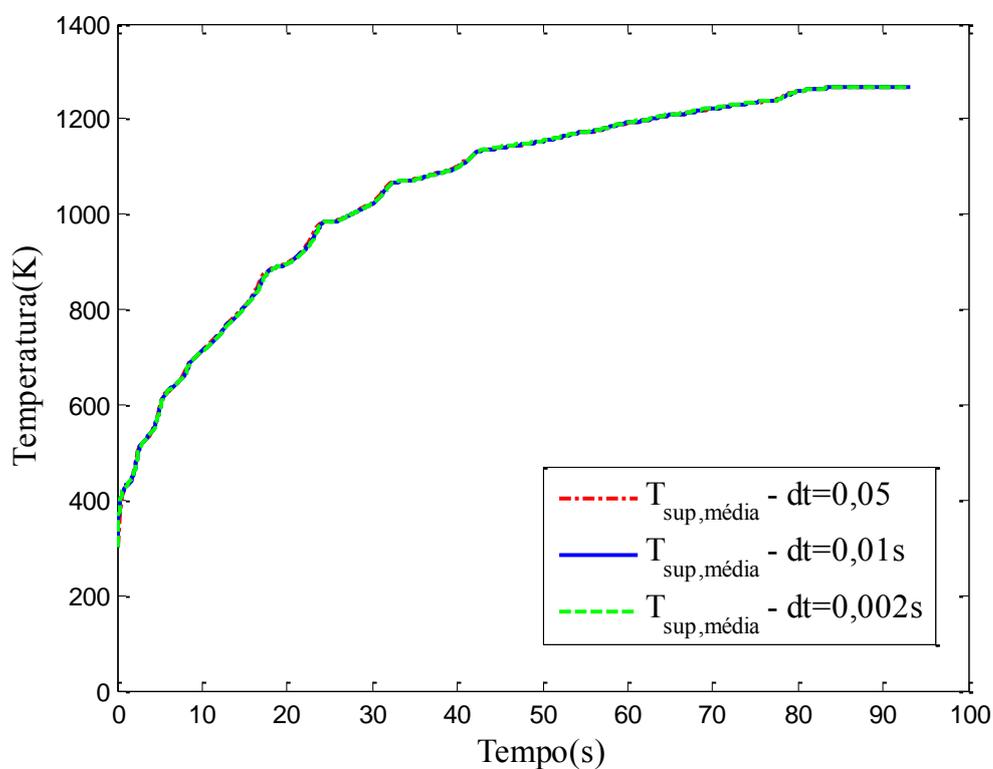


Figura 5.14 – Temperatura superficial média da partícula: teste temporal de malha

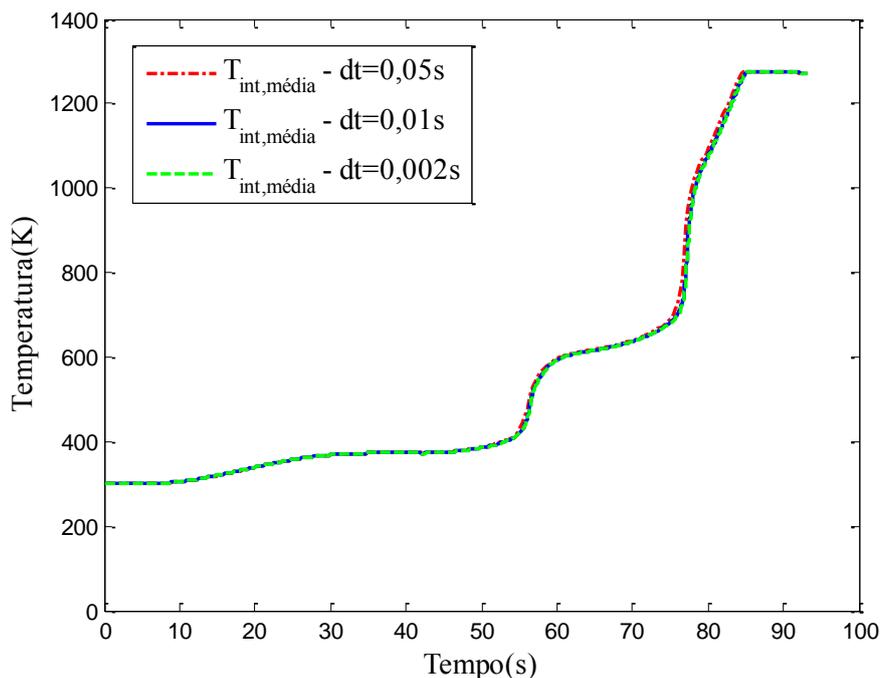


Figura 5.15 - Temperatura no interior da partícula: teste temporal de malha

O tempo de CPU gasto nas simulações em horas, versus passo de tempo é apresentado na Fig. (5.16). Na medida em que se diminui o passo de tempo, o tempo computacional aumenta muito. Levando em consideração os tempos de CPU e os resultados obtidos pelos três passos de tempo, conclui-se que o passo de tempo, $\Delta t = 0,01s$, apresenta resultados que podem ser utilizados para uma análise segura dos fenômenos associados à secagem.

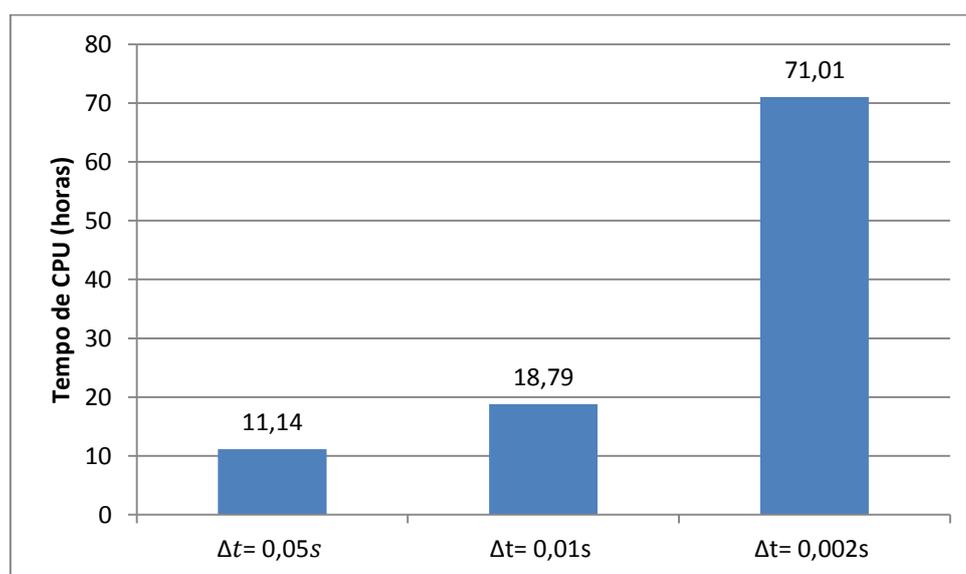


Figura 5.16 - Tempo de CPU gasto nas simulações do teste de sensibilidade temporal

A malha utilizada nas simulações será a malha intermediária composta de 5239 nós e 9440 elementos. O meio poroso é representado por 398 nós. Cada nó possui as propriedades do meio que representa. Assim os nós do meio poroso possuem propriedades do meio poroso e os nós do meio fluido possuem as propriedades do meio.

5.4 PROCESSAMENTO: SOLUÇÃO NUMÉRICA DO MODELO MATEMÁTICO.

As simulações numéricas foram realizadas com uma versão do código de dinâmica dos fluidos computacional desenvolvido em Cunha (2010). Neste código as equações diferenciais de conservação são discretizadas seguindo o método de volumes de controle baseado em elementos (transformação das equações diferenciais em equações algébricas) (Taylor, 2002). Um esquema implícito de primeira ordem (método de Euler) é utilizado na discretização do termo temporal, um esquema de interpolação exponencial *upwind*, conhecido como FLO, é utilizado na discretização dos termos advectivos e um esquema de interpolação linear é utilizado na discretização dos termos difusivos (Cunha, 2010). As equações algébricas resultantes da discretização são resolvidas por meio de um método de solução direta disponível no Matlab. As equações são resolvidas de forma segregada (separadamente e sequencialmente), de forma similar ao que é descrito pelo algoritmo SIMPLE de Patankar (1980). O código utiliza precisão dupla em todos os cálculos.

6. RESULTADOS

6.1 CONSIDERAÇÕES

Nos próximos tópicos serão apresentados os resultados da simulação da secagem e da pirólise de uma partícula de biomassa.

Perfis de temperatura e de conversão de massa, devido à secagem e à pirólise, experimentalmente determinados por Hong Lu (2006) foram utilizados como referência para validação do modelo proposto. Os experimentos foram baseados em amostras cilíndricas de madeira dura do tipo Poplar, com conteúdo de umidade de 40% em massa base seca; 9,5 mm diâmetro e razão altura/diâmetro de 4. Hong Lu (2006) realizou as medidas de temperatura com termopar tipo K e a perda de massa foi medida com balança de precisão.

Hong Lu (2006) relatou que as paredes do reator utilizado nos experimentos não possuíam temperatura uniforme na direção axial, porém determinou uma temperatura média na posição da partícula (1276 K) e também enfatizou que as incertezas associadas às medidas de temperatura eram maiores que as associadas à perda de massa. Além disso, comentou que o contato do termopar com as amostras e que as posições nas quais os termopares eram colocados, se radial ou axial, influenciavam na precisão da medição da temperatura.

Os resultados simulados para os perfis de temperatura são comparados com duas curvas experimentais obtidas por Hong Lu (2006), a curva experimental 1 refere-se as medições obtidas com o termopar na direção radial e a curva experimental 2 refere-se as medições obtidas com o termopar na direção axial.

Com base nos comentários, os dados de perda de massa terão um peso maior para efeito de validação do modelo proposto.

As propriedades da biomassa simulada foram obtidas do trabalho de Hong Lu (2006) e são apresentadas na Tab. (6.1). Os parâmetros titulados emissividade mostrados nas Tab. (6.1) foram estimados para melhor concordância dos resultados numéricos com os experimentais. A composição elementar utilizada para o cálculo da condutividade térmica e do calor específico foi de uma madeira macia, cuja composição é apresentada na Tab. (6.2).

Tabela 6.1 – Propriedades da biomassa simulada

Propriedade	Valor	Fonte
Área Superficial, S	$1 \times 10^6 \text{ m}^2 \text{ m}^{-3}$	Hong Lu (2006)
Diâmetro do poro, d_p	$10 \times 10^{-6} \text{ m}$	Estimado
Massa específica aparente	580 kg/m^3	Hong Lu (2006)
Emissividade da biomassa	0,7	Estimado com base nas simulações
Emissividade do resíduo carbônico	0,8	Estimado com base nas simulações
Emissividade das cinzas	0,5	Estimado com base nas simulações
Porosidade Combustível Seco	0,6	Calculado

Tabela 6.2 – Análise elementar madeira macia

Análise Imediata (% , base seca)			Análise Elementar				
Voláteis	Combustível	Cinza	% C	% H	% N	% S	% O
35,6	52,8	11,6	82,4	5,9	1,3	0,9	9,5

Fonte: Ragland & Aerts (1991) (Adaptado)

A seguir no tópico 6.2 serão apresentados os resultados referentes à conversão de massa, com a comparação com dados experimentais. No tópico 6.3 serão apresentados os resultados referentes aos perfis de temperatura interna e superficial da partícula, bem como a comparação com dados experimentais. No tópico 6.4 serão apresentados os campos de temperatura, velocidade e porosidade durante o processo de secagem. E finalmente no tópico 6.5 serão apresentados os resultados comparativos entre os três modelos de taxa de evaporação aqui abordados: modelo cinético, modelo de equilíbrio térmico e modelo convectivo.

6.2 CONVERSÃO DE MASSA

Um dos objetivos do trabalho está na predição das curvas de conversão de massa em função do tempo, referente os processos de secagem e pirólise. Para calcular a taxa de evaporação utilizou-se três modelos matemáticos encontrados na literatura, sendo estes, modelo cinético, modelo de equilíbrio térmico e modelo convectivo.

Nas Figuras (6.1), (6.2) e (6.3) são apresentadas as curvas de conversão de massa para o modelo cinético, de equilíbrio térmico e convectivo, respectivamente, juntamente com as curvas experimentais obtidas por Hong Lu (2006).

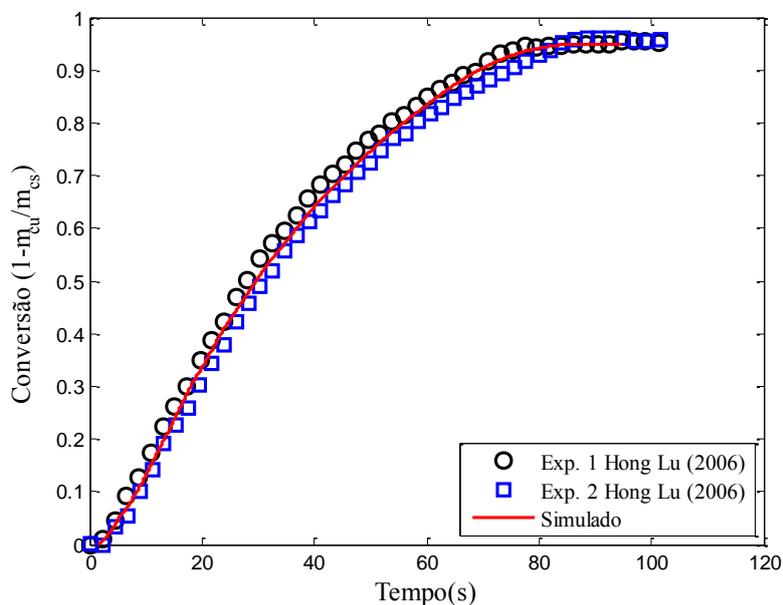


Figura 6.1 - Comparação curvas de conversão de massa em função do tempo para o modelo cinético

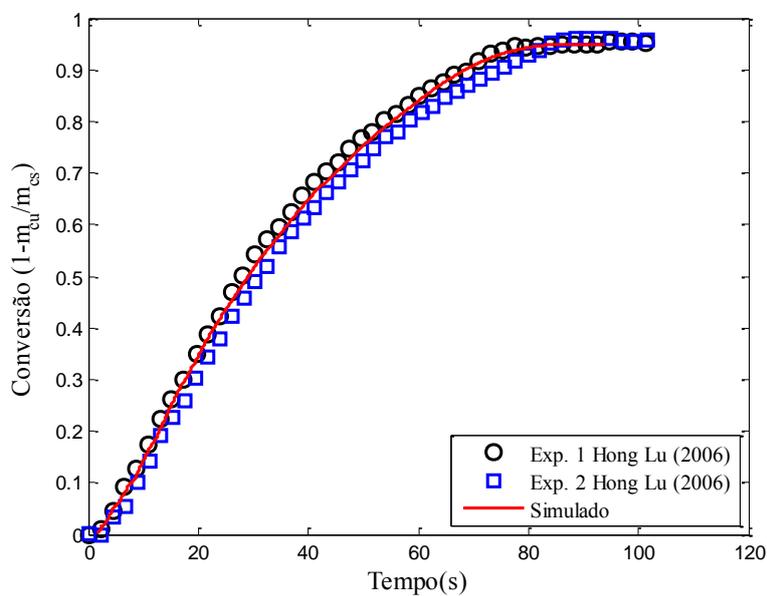


Figura 6.2 - Comparação curvas de conversão de massa em função do tempo para o modelo de equilíbrio térmico

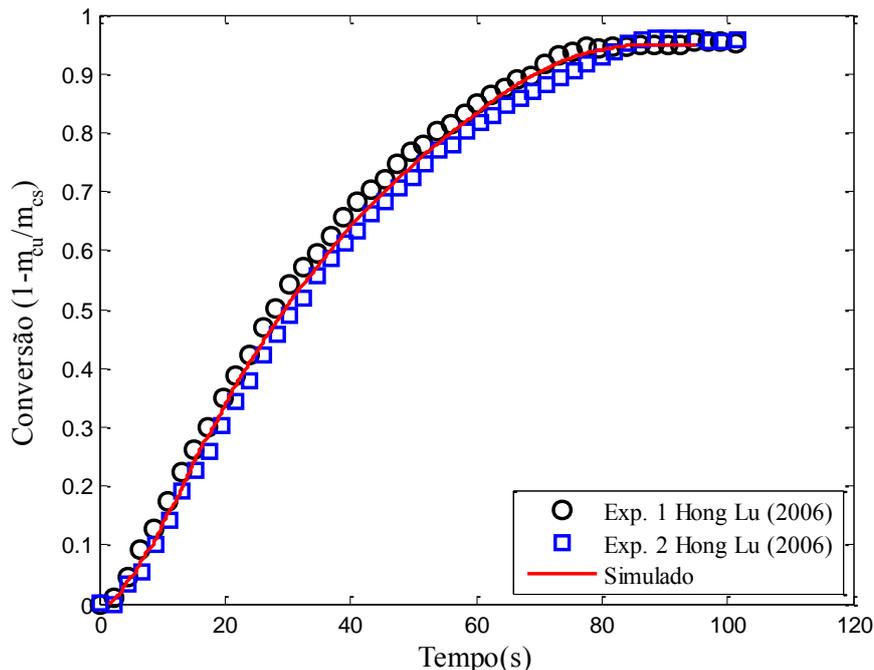


Figura 6.3 - Comparação curvas de conversão de massa em função do tempo para o modelo convectivo

Constata-se da análise das Figuras (6.1), (6.2) e (6.3) uma boa concordância entre os perfis de conversão de massa simulados e os perfis experimentais. Como já mencionado Hong Lu (2006) enfatizou que as incertezas associadas à perda de massa eram bem pequenas, tendo este resultado de perda de massa maior peso para efeito de validação do modelo proposto. Verifica-se que o resultado da conversão de massa por ambos os modelos se assemelha bastante com o resultado experimental. Para o modelo cinético (Fig. 6.1) a partícula estaria seca em 93,25 segundos, para o modelo de equilíbrio térmico (Fig. 6.2) este tempo é de 92,28 segundos, já no modelo convectivo (Fig. 6.3) 93,43 segundos.

Nos perfis de conversão de massa mostrados é possível verificar que metade da massa é convertida em torno de 28 segundos, a metade restante demora muito mais tempo para ser convertida em vapor, em torno de 65 segundos.

Analisando a conversão apenas da umidade em vapor de água bem como a influência da temperatura neste fenômeno, na Fig. (6.4) é apresentado um gráfico de umidade e temperatura interna da partícula em função do tempo referente ao modelo cinético. Na Figura (6.4), m_{umidade} e $m_{\text{partícula}}$ representam a massa de umidade e a massa total da partícula, respectivamente. Percebe-se que o conteúdo de umidade inicial presente na partícula, 40%, demora em torno de 53 segundos para ser convertido em vapor, durante

este tempo percebe-se que a temperatura interna da partícula permanece quase que constante em 373 K (100°C), e após toda umidade se evaporar, a temperatura aumenta rapidamente, até certo ponto em que a temperatura volta a aumentar em uma menor taxa, neste ponto inicia-se o processo de pirólise no interior da partícula.

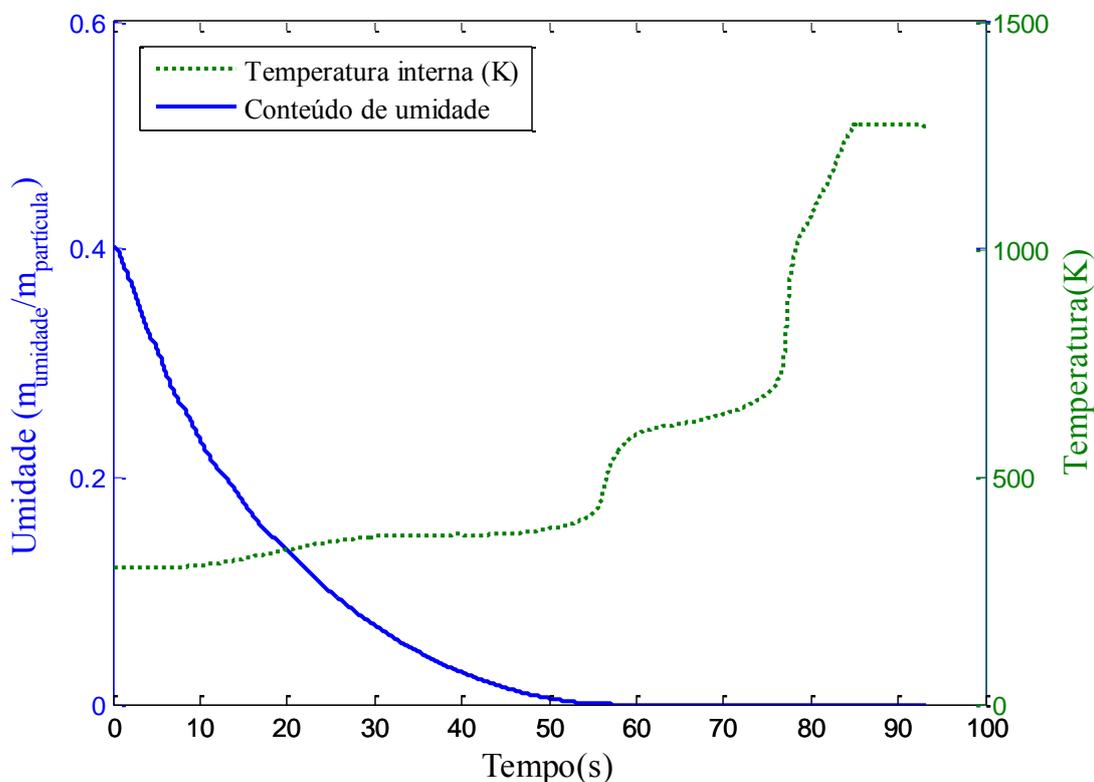


Figura 6.4 - Umidade versus Temperatura interna – modelo cinético

Na Figura (6.5) é apresentada a curva de degradação dos constituintes da biomassa, celulose, hemicelulose e lignina, juntamente com a curva de formação de resíduo carbonoso (carvão), estes constituintes se referem a massa da partícula seca. No tópico 4.4 quando apresentado o modelo de pirólise utilizado no presente trabalho as frações mássicas de hemicelulose, celulose e lignina foram apresentadas, sendo 0,313, 0,553 e 0,134, respectivamente.

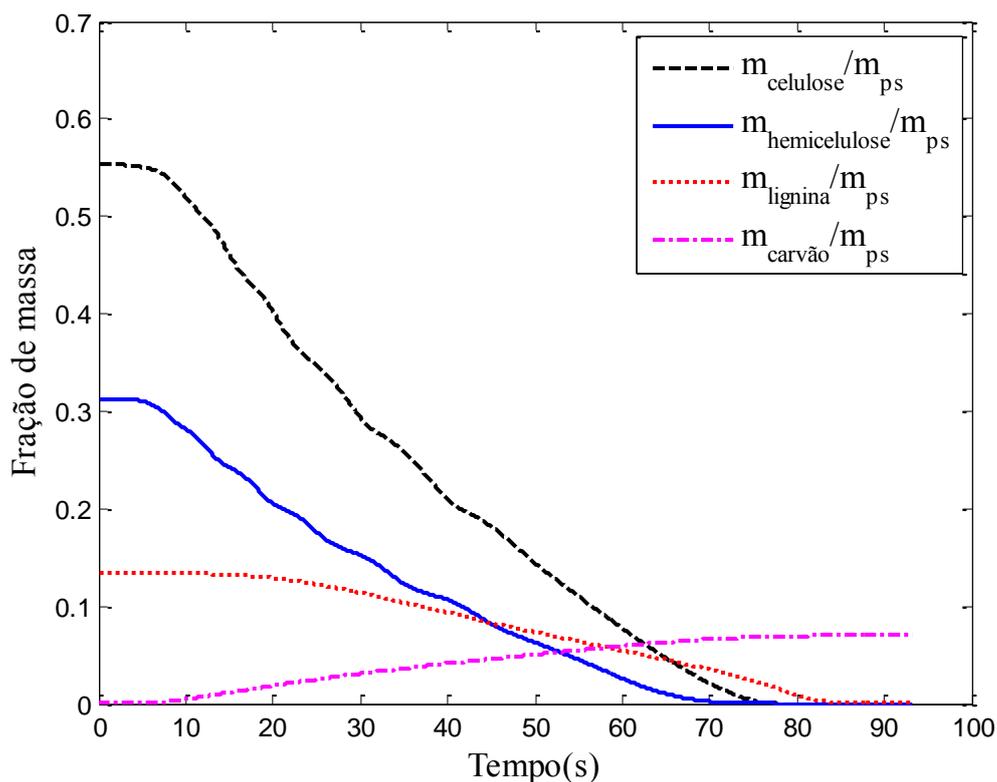


Figura 6.5 - Degradação dos constituintes da biomassa

Da Figura (6.5) percebe-se que as curvas de hemicelulose, celulose e lignina iniciam-se nas frações estabelecidas para cada, e ao decorrer do processo estas se degradam totalmente. Percebe-se que apesar da lignina estar em menor fração do que os outros constituintes, esta demora mais tempo para se degradar.

A partir dos resultados experimentais de Hong Lu (2006) verificou-se que ao final do processo de conversão de massa restava-se 7% de carvão ou coque. Este parâmetro foi utilizado no presente trabalho, e percebe-se que ao final do processo há em torno de 7% de carvão.

Na Figura (6.6) é apresentada as curvas de degradação de cada constituinte considerando a massa destes unitárias isoladamente.

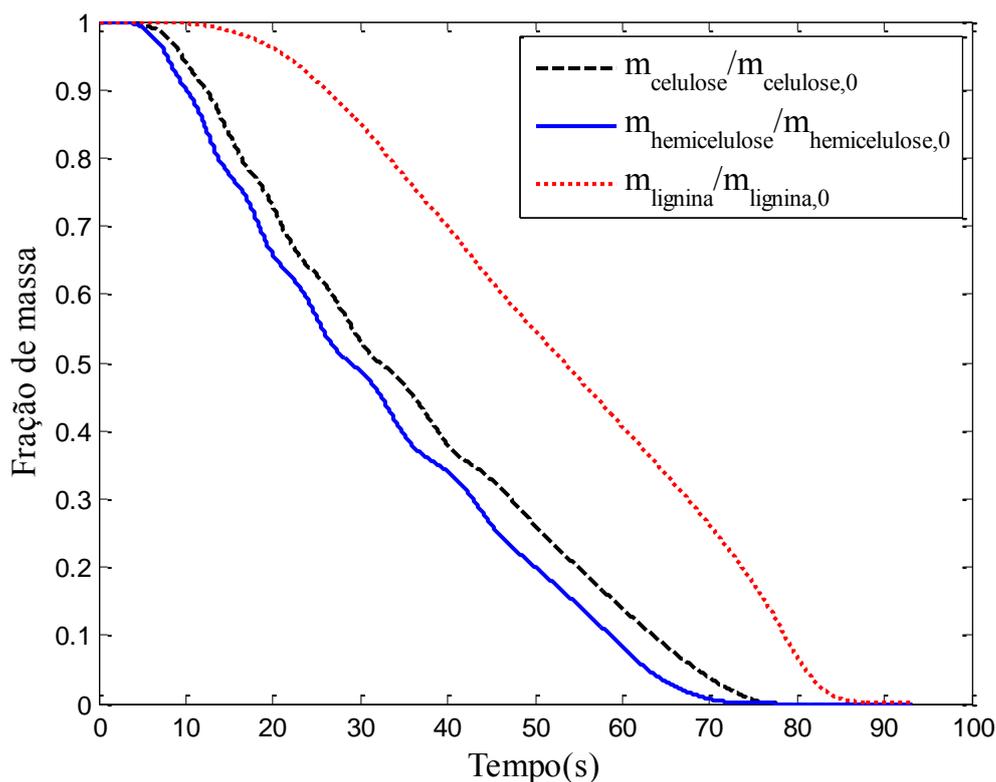


Figura 6.6 - Degradação unitária dos constituintes da biomassa

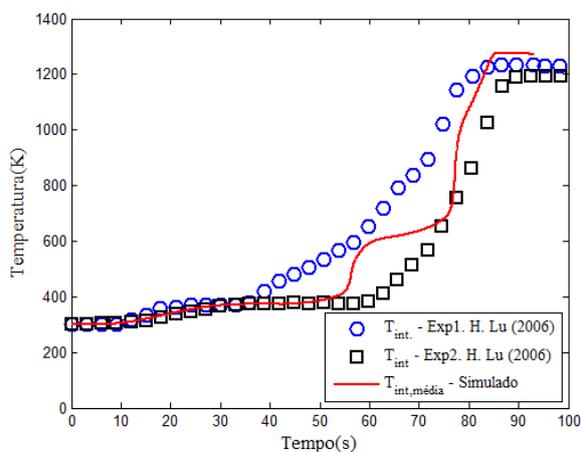
Com base no exposto na Fig. (6.6) percebe-se que a celulose e a hemicelulose se degradam quase que ao mesmo tempo, e devem formar uma única frente de pirólise, estas demoram em torno de 71 e 75 segundos, respectivamente, para se degradarem totalmente, já a lignina possui mais resistência à degradação térmica, e demora em torno de 86 segundos para se degradar totalmente.

6.3 PERFIS DE TEMPERATURA

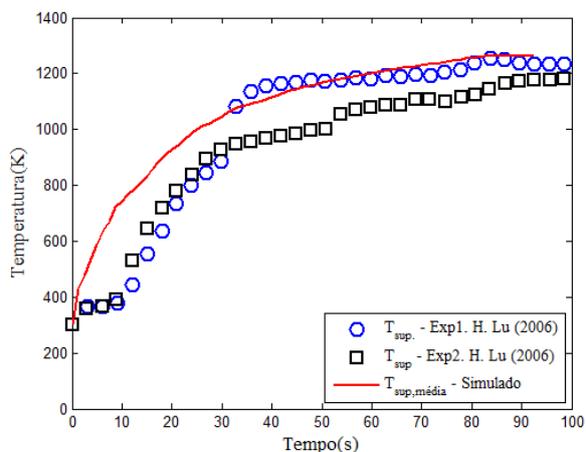
A Figura (6.7) apresenta a comparação dos resultados da variação de temperatura no interior da partícula e na superfície da partícula para o modelo cinético, de equilíbrio térmico e convectivo, com os resultados experimentais obtidos por Hong Lu (2006).

Visualiza-se por meio da Fig. (6.7) concordância entre as curvas experimentais e as curvas simuladas tanto para a predição da temperatura no interior da partícula quanto na superfície da partícula. Também é perceptível a semelhança entre as curvas simuladas para os três modelos.

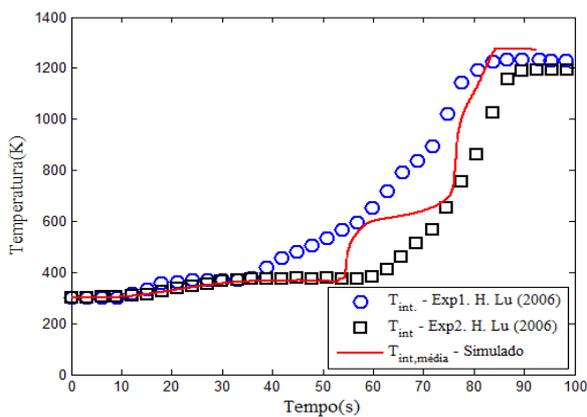
(a) Temperatura Interna – Modelo Cinético



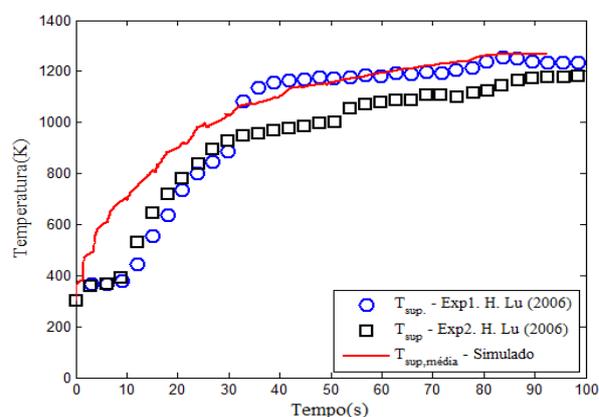
(b) Temperatura Superficial – Modelo Cinético



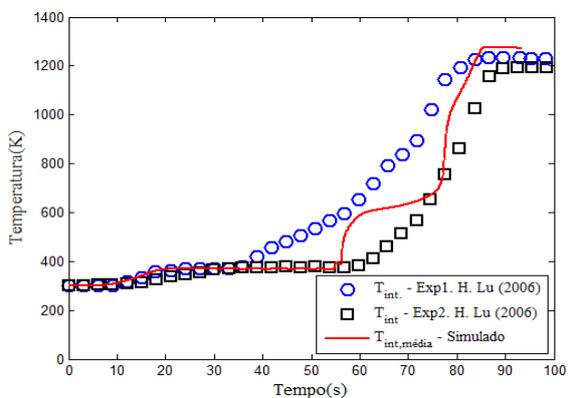
(c) Temperatura Interna – Modelo de Equilíbrio Térmico



(d) Temperatura Superficial – Modelo de Equilíbrio Térmico



(e) Temperatura Interna – Modelo Convectivo



(f) Temperatura Superficial – Modelo Convectivo

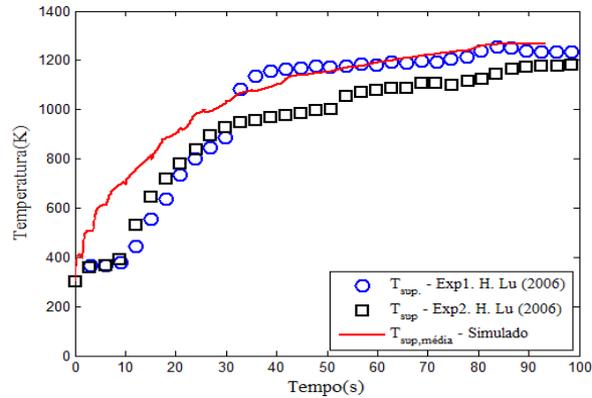


Figura 6.7 - Perfis de temperatura interna e superficial

No interior da partícula (Fig. 6.7a, Fig. 6.7c e Fig. 6.7e) a semelhança é mais evidente na região da temperatura de evaporação da água (373 K), aonde a curva tende a ficar constante nesta temperatura até o fim da secagem no interior da partícula. Percebe-se que a curva experimental 1 e a curva experimental 2 de Hong Lu (2006) se diferem bastante no intervalo de tempo entre 40 e 85 segundos, segundo o autor as incertezas associadas as medições de temperatura eram maiores que as associadas à perda de massa, devido a dificuldade de manter o termopar em contato com a partícula, e também pelo fato da posição do termopar, radial ou axial, influenciar na precisão da medição. Percebe-se que as curvas simuladas se encontram entre as duas curvas experimentais, o que rende uma boa aproximação entre os resultados diante do pressuposto comentado pelo autor.

Na predição da temperatura na superfície da partícula (Fig. 6.7b, Fig. 6.7d e Fig. 6.7f) a curva simulada possui um formato semelhante das curvas experimentais, porém verifica-se que na curva simulada o aumento de temperatura no início do processo é mais rápido do que nas experimentais. Verifica-se que a temperatura média da superfície da partícula aumenta rapidamente no início do processo (entre 0 e 40 segundos), neste intervalo de tempo a temperatura aumentou de 373 K para cerca de 1100 K, depois a temperatura aumenta de 1100 K a 1264 K. Todos os modelos apresentaram comportamento parecido com ocorrido com as curvas experimentais.

Analisando os perfis de temperatura superficial e interna para o modelo de equilíbrio térmico verifica-se que há muita oscilação, sendo mais evidente na curva de temperatura superficial (Fig. 6.7d). Analisando a literatura percebeu-se que alguns autores (Porteiro *et al.*, 2007 e Yang *et al.*, 2007), consideram que somente parte do calor absorvido pela partícula (mais usualmente 50%) deva ser utilizado para o cálculo da taxa de perda de massa no processo de secagem. Simulando o caso do modelo de equilíbrio térmico considerando apenas 50% do calor absorvido para o cálculo da taxa de evaporação não se notou diferença significativa com o modelo tradicional em relação às curvas de temperatura, verificando também a ocorrência de oscilações.

Nas Figuras (6.8), (6.9) e (6.10) são apresentadas as curvas de variação de temperatura no centro da partícula e na superfície da partícula em função do tempo, para o modelo cinético, modelo de equilíbrio térmico e modelo convectivo, respectivamente. Os pontos de medições das temperaturas foram mostrados na Fig. (5.4) no tópico 5.1.

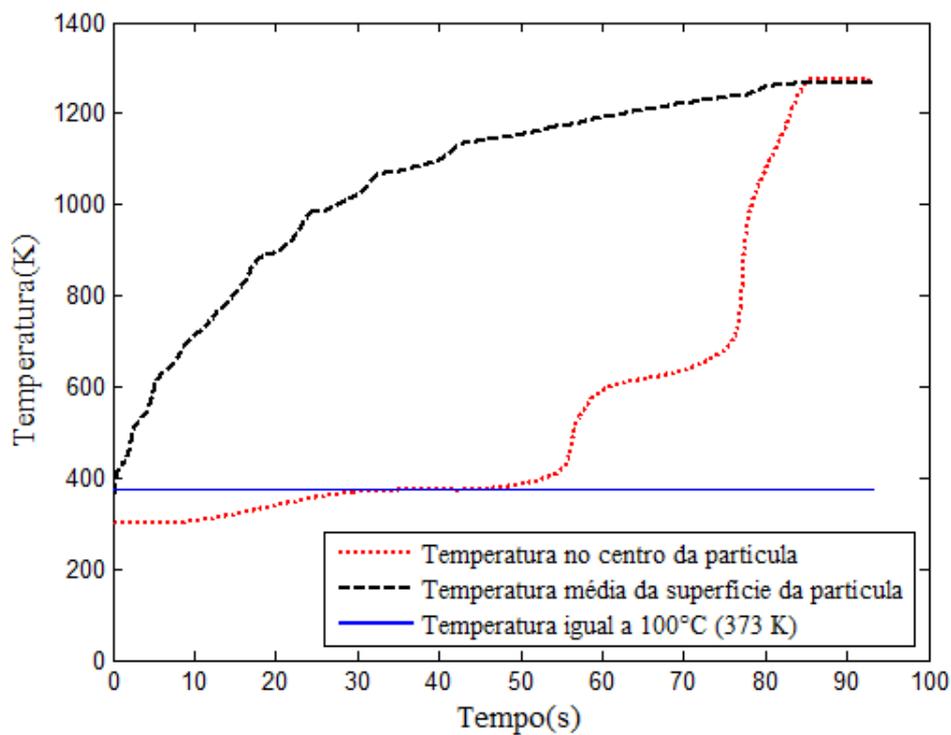


Figura 6.8 – Curvas de temperatura em função do tempo – modelo cinético

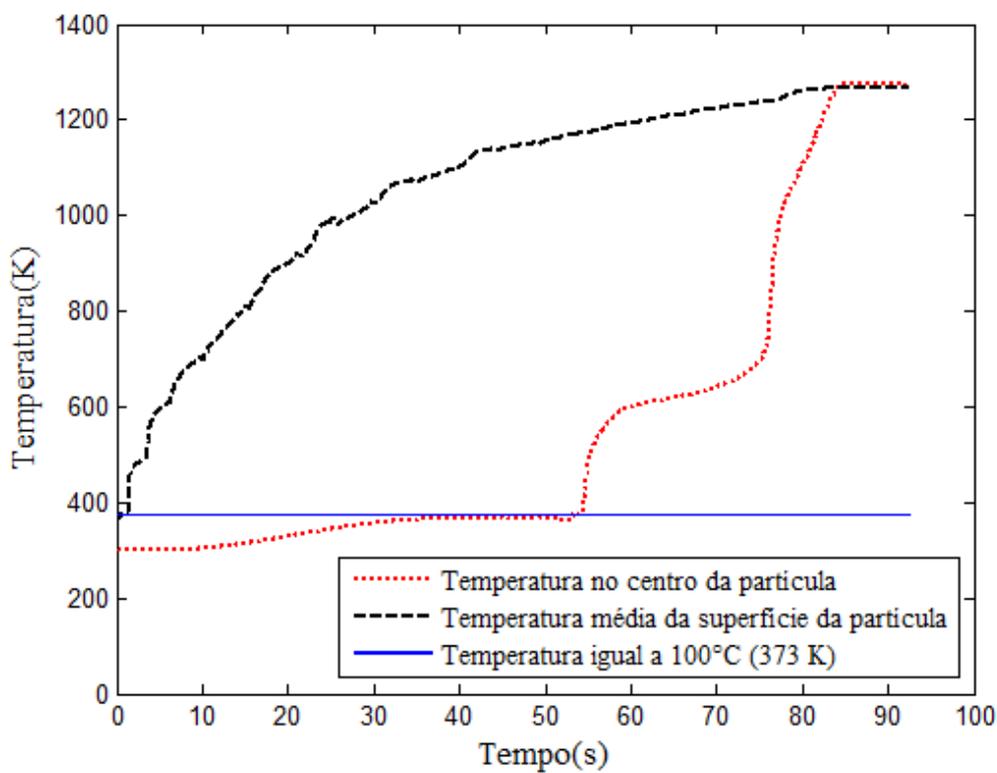


Figura 6.9 - Curvas de temperatura em função do tempo – modelo de equilíbrio térmico

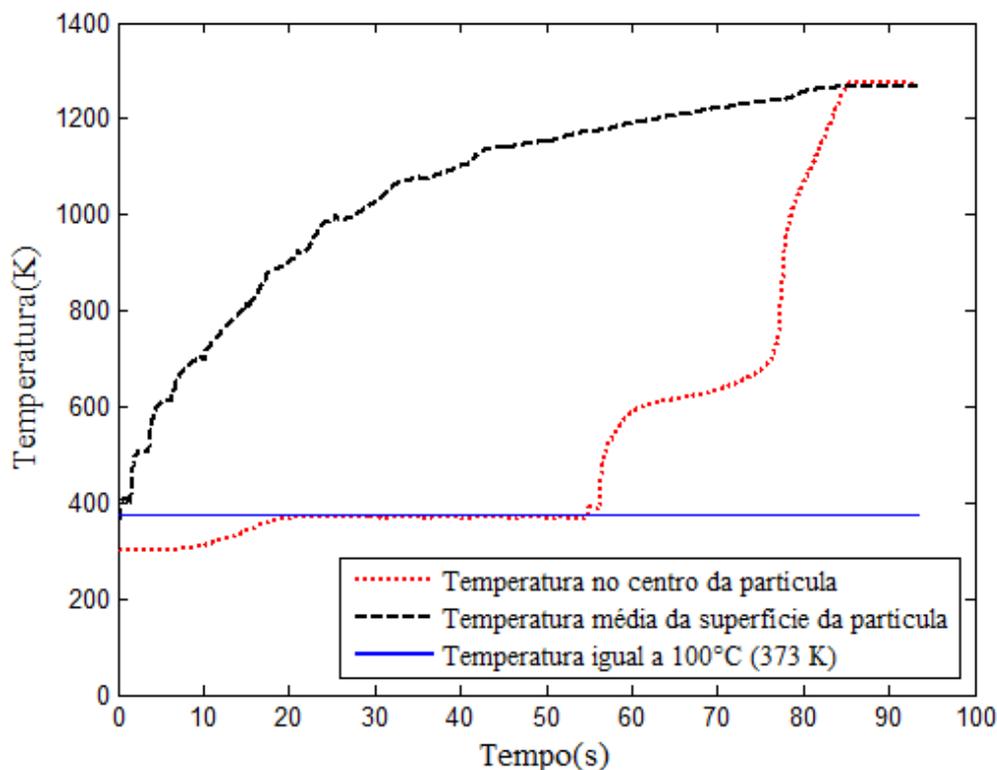


Figura 6.10 – Curvas de temperatura em função do tempo – modelo convectivo

Verifica-se por meio da Fig. (6.8) que a temperatura no centro da partícula para o modelo cinético chega a 373 K (100°C) em torno de 36 segundos, neste mesmo tempo a temperatura média da superfície da partícula é de 1093 K (820°C).

No modelo de equilíbrio térmico (Fig. 6.9) o centro da partícula chega a 373 K (100°C) em torno de 36 segundos e permanece constante até 54 segundos, nesse intervalo de tempo ocorre o processo de secagem no interior da partícula.

Na Fig. (6.10) que se refere ao modelo convectivo, percebe-se um comportamento diferente dos outros modelos quando o perfil de temperatura no centro da partícula. A temperatura interna aumenta rapidamente até 100°C, demora só 20s para chegar a esta temperatura, e permanece nessa temperatura até 54,89s. Depois deste instante a temperatura rapidamente chega a 630K.

Verifica-se que em todos os modelos após a temperatura no interior da partícula atingir 100°C esta aumenta rapidamente até um ponto em que a taxa de crescimento diminui devido o processo de pirólise da partícula. A taxa de aquecimento diminui porque o fluxo de gases de pirólise acontece em sentido oposto ao fluxo de calor e também porque foi considerado que a pirólise é endotérmica.

Os perfis referentes à temperatura média da superfície da partícula dos modelos propostos são bem semelhantes, não havendo nenhuma diferença significativa. Tanto a temperatura média da superfície da partícula quanto à temperatura no centro da partícula no final do processo de secagem é próximo de 1276 K, mesma temperatura posta como condição de contorno para temperatura da parede do reator, logo como já era de se esperar a partícula tende a se equilibrar com o meio em que está.

6.4 CAMPOS DE TEMPERATURA, VELOCIDADE E POROSIDADE

Variações do campo de temperaturas, do campo de velocidades e da porosidade da partícula são apresentadas nas Figuras (6.11), (6.12) e (6.13), respectivamente. Os mesmos se referem à simulação do modelo cinético, os resultados desta são semelhantes aos resultados para os outros modelos, assim para tornar o trabalho menos repetitivo omitiram-se esses dados.

Na Figura (6.11) é apresentado o campo de temperaturas para 10 instantes de tempo. No instante inicial a temperatura da partícula é de 298 K (temperatura ambiente 25°C), ao iniciar o processo de secagem gradientes de temperatura vão se formando no interior da partícula, e verifica-se que no instante $t=1s$ a umidade presente na superfície da partícula já começa a evaporar. O instante $t=54s$ é o instante em que a temperatura média no interior da superfície chega a 100°C, neste instante verifica-se que uma grande área da partícula já está próxima ou a 1000°C. No instante $t=93s$, quando já se converteu quase 100% da massa da partícula, a temperatura da partícula está em torno dos 1276 K.

Analisando a Fig. (6.12) percebe-se que no instante inicial não é considerado escoamento no interior da partícula, porém para os outros instantes de tempo existe escoamento de gases (formados devido secagem e pirólise) do interior para o exterior do meio poroso (madeira). Verifica-se a formação de vórtices no instante inicial quando o gás gerado pela partícula escoar para fora desta em sentido contrário ao escoamento do gás de secagem. Porém pode-se visualizar que o escoamento tende a se normalizar depois de algum tempo.

O campo de velocidades formado na interface entre os meios é bastante complexo espacialmente e varia com o tempo. Caso o campo de velocidades na interface entre os meios fosse necessário como condição de contorno dificilmente o padrão observado poderia ser reproduzido.

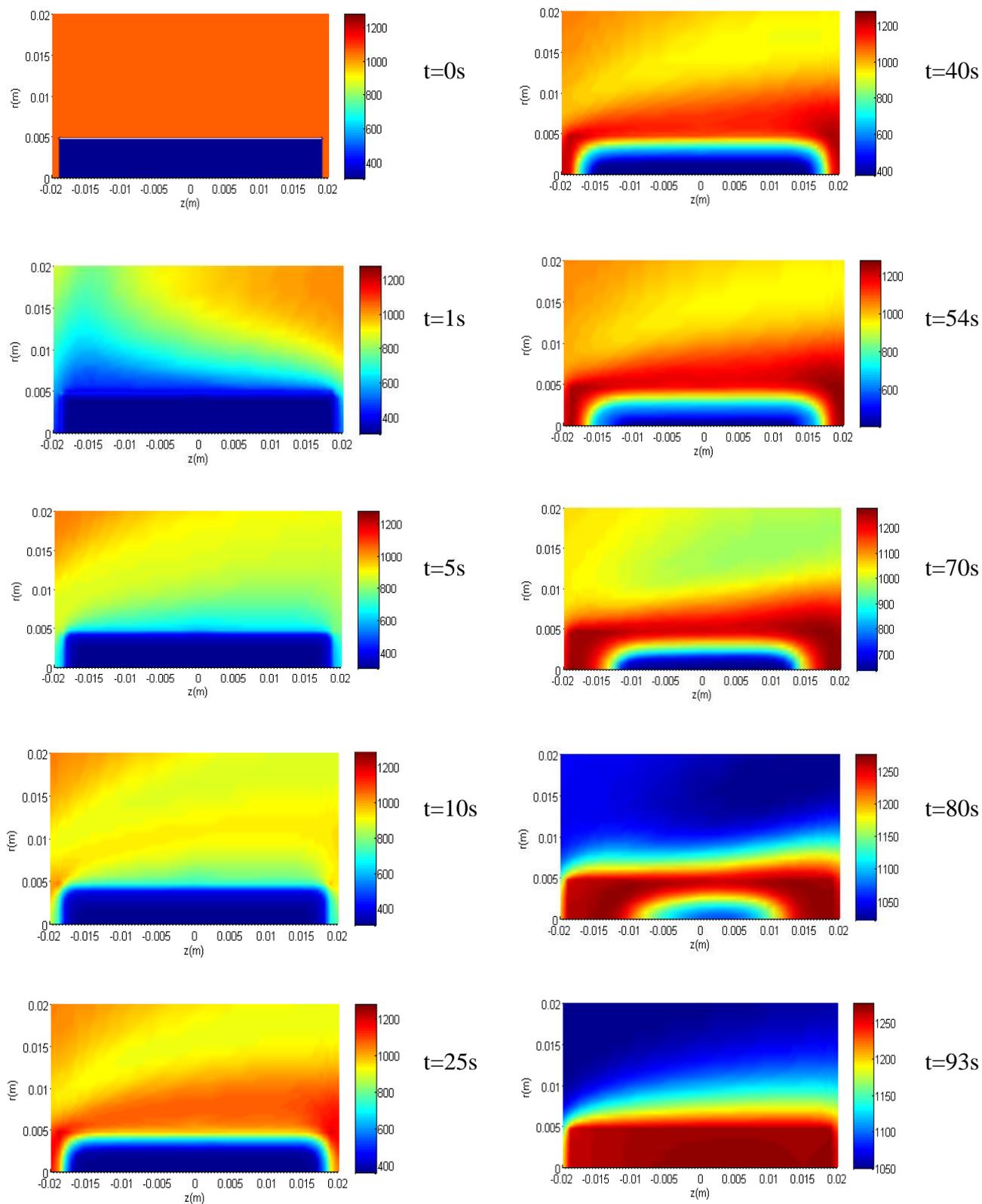


Figura 6.11 - Variação da temperatura em relação ao tempo

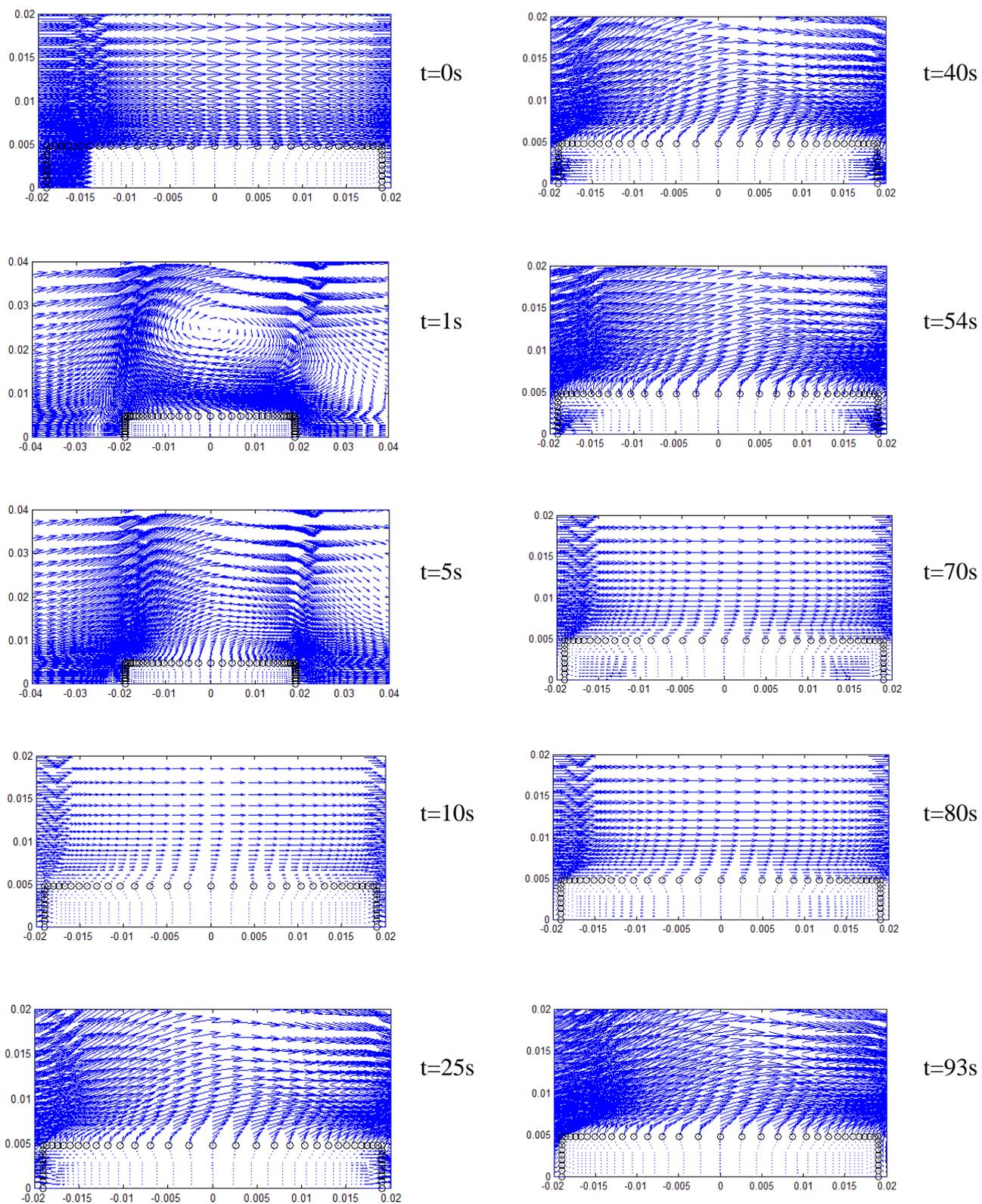


Figura 6.12 - Campos de velocidade em diversos instantes de tempo

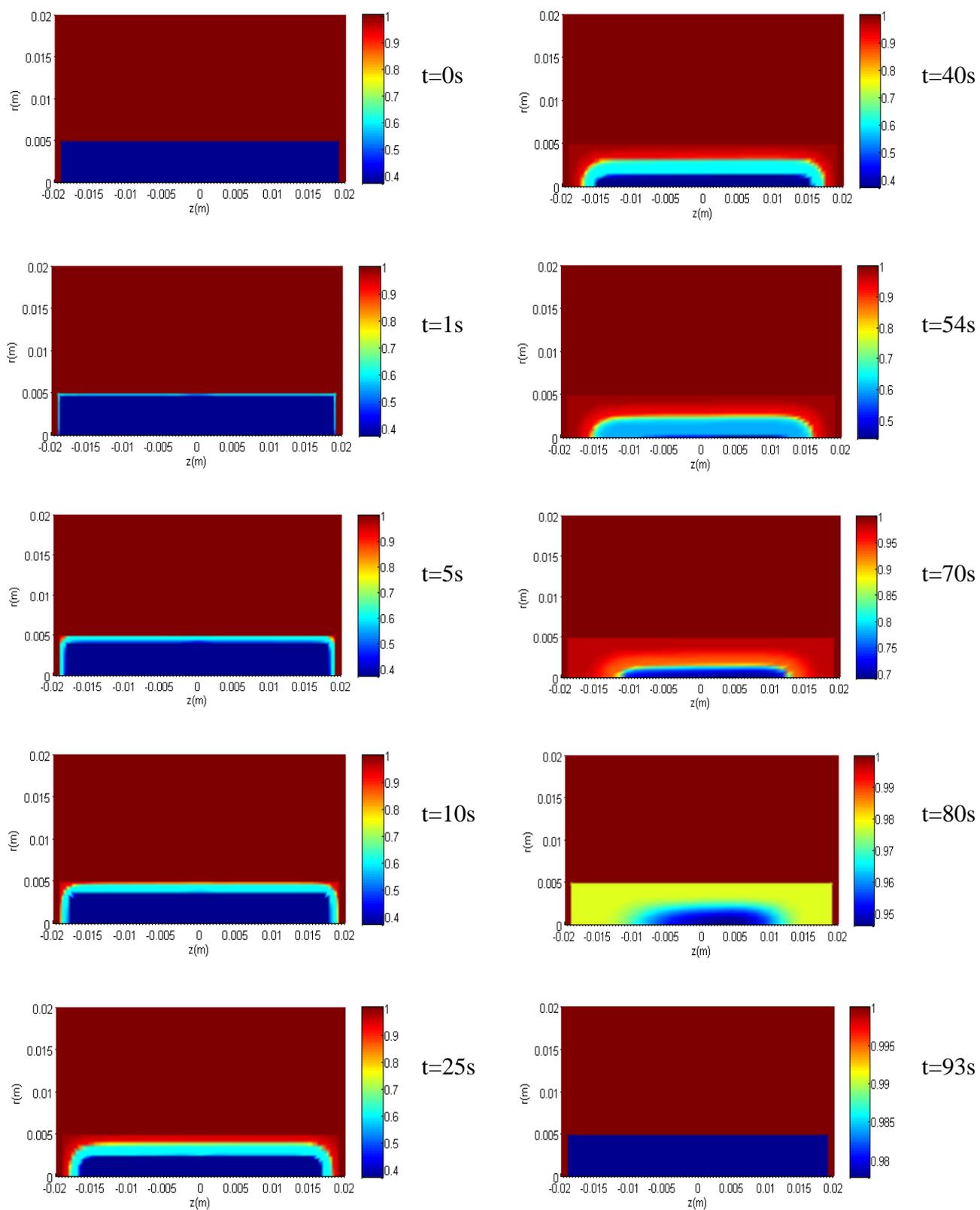


Figura 6.13 - Variação da porosidade em relação ao tempo

Por se tratar de uma partícula termicamente espessa, a porosidade avança definindo frentes de secagem e pirólise a partir da superfície até o centro do cilindro, como apresentado na Fig. (6.13). O modelo de pirólise implementado utiliza três taxas cinéticas, uma para celulose, uma para hemicelulose e uma para lignina, assim diferentes frentes de pirólise também podem ocorrer. Considerando a Fig. (6.13) no instante $t=54$ segundos, na parte em vermelho da partícula (mais externa) tanto secagem quanto pirólise já ocorreram. Na parte azul claro (intermediária), a madeira está pirolisando, além disso, a hemicelulose e a celulose nesta região já foram quase que totalmente convertidas, por serem mais reativas, já a lignina ainda está sendo convertida.

A porosidade, como já dito, representa a fração de volume de vazios de um sólido, e como esta foi posta como função da conversão de massa, assim, na medida em que a umidade é convertida em vapor, a porosidade deve aumentar localmente. Nota-se claramente a formação de uma frente de secagem e o avanço desta com o passar do tempo na Fig. (6.13). Verifica-se ainda que a frente de secagem é bastante uniforme e simétrica.

6.5 RESULTADOS INERENTES A COMPARAÇÃO DO MODELO CINÉTICO, DE EQUILÍBRIO TÉRMICO E CONVECTIVO PARA O CÁLCULO DA TAXA DE CONVERSÃO DE MASSA E DOS PERFIS DE TEMPERATURA

Nas seções 6.2, 6.3 e 6.4 foram apresentados resultados do modelo cinético, de equilíbrio térmico e convectivo, bem como a comparação destes com resultados experimentais obtidos por Hong Lu (2006). Verificou-se uma excelente convergência entre as curvas de conversão de massa em função do tempo dos modelos simulados com as curvas experimentais. Analisando as três curvas simuladas para conversão de massa a partir dos três modelos propostos, Fig. (6.14), verifica-se que estas convergem entre si. Analisando a conversão apenas da umidade em vapor de água, apresentada na Fig. (6.15) percebe-se que há uma boa similaridade entre as curvas. As curvas do modelo cinético e convectivo são um pouco mais próximas. Percebe-se que o tempo final do processo é praticamente igual para os três modelos.

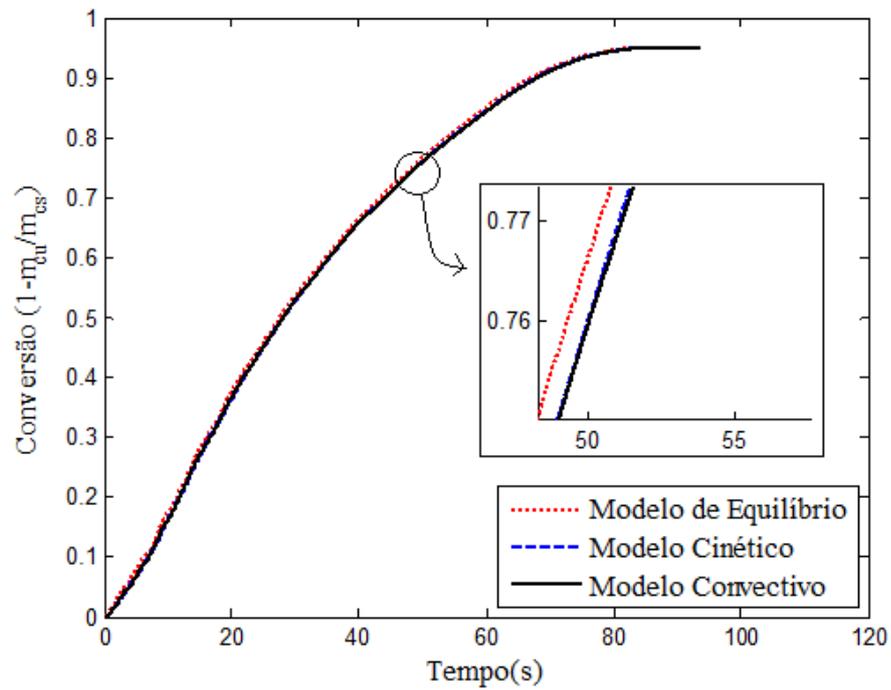


Figura 6.14 - Comparação curvas de conversão de massa em função do tempo dos modelos propostos

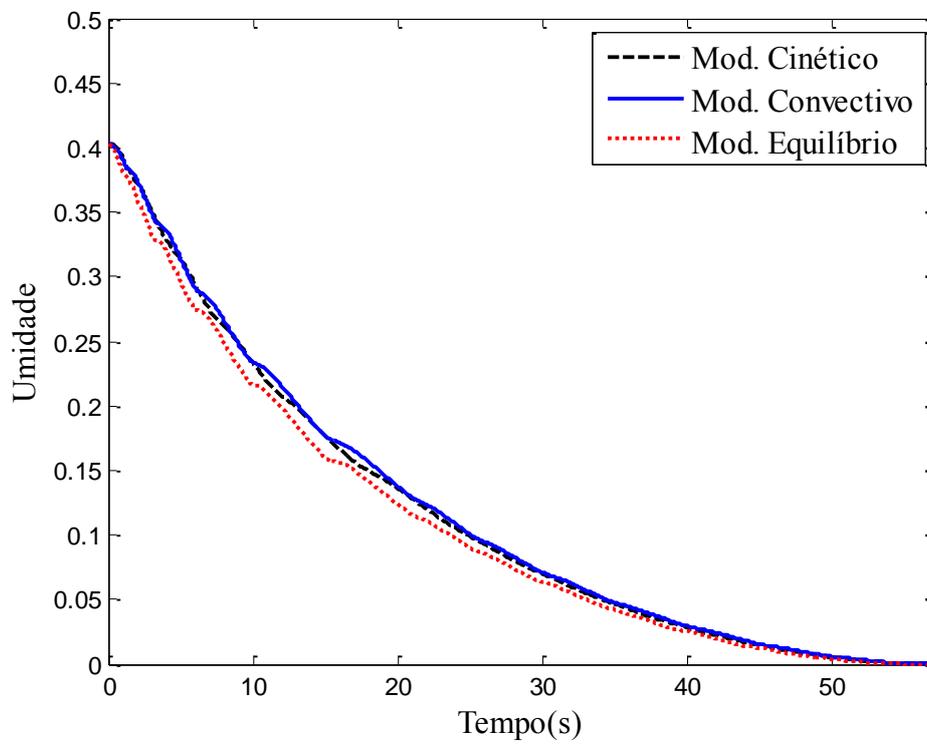


Figura 6.15 - Conversão de umidade em vapor

Analisando a região em destaque apresentada na Fig. (6.14) verifica-se que a taxa de conversão de massa pelo modelo de equilíbrio térmico é maior no intervalo delimitado do que as do modelo cinético e do modelo convectivo.

Analisando o tempo total do processo de secagem para que a partícula esteja seca, o modelo de equilíbrio térmico tem um tempo estimado de 92,44s, o modelo cinético de 93,22s e o modelo convectivo de 93,43s. A Figura (6.16) apresenta a comparação da variação de temperatura no interior da partícula em função do tempo dos três modelos propostos.

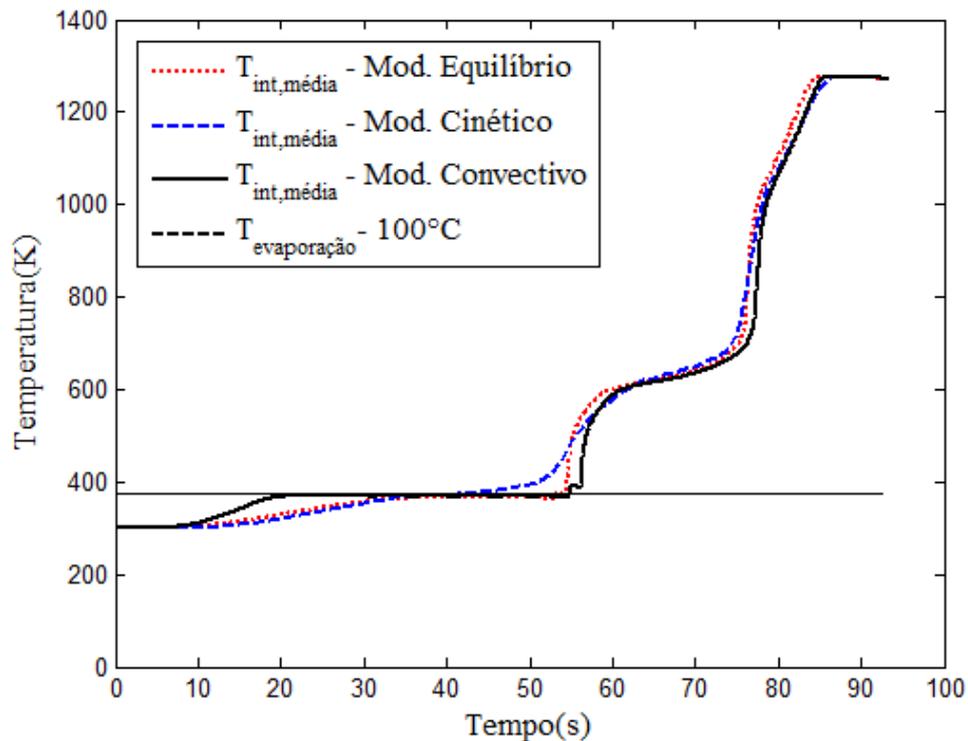


Figura 6.16 - Comparação curvas de temperatura no interior da partícula simuladas em função do tempo

Por meio da Fig. (6.16) verifica-se um comportamento semelhante entre as três curvas simuladas quanto à predição da temperatura no interior da partícula, sendo evidente uma diferença nos perfis de temperatura na região da temperatura de evaporação. Tanto no modelo de equilíbrio térmico quanto no modelo convectivo a temperatura no interior da partícula fica um longo intervalo de tempo a 100°C, neste intervalo de tempo ocorre o processo de secagem no interior da partícula. No modelo de equilíbrio térmico este intervalo é de 16,65s, começando em 36,5s e terminado em 53,15s. No modelo convectivo este intervalo de tempo é de 34,24s, mais de 1/3 do tempo total do processo de secagem, começando em 20,65s e terminando quando a temperatura enfim chega a 100°C em 54,89s. No modelo cinético a

temperatura no interior da partícula chega a 100°C em 41,37s, não tendo o comportamento de resistência do aumento de temperatura nesta região como nos modelos de equilíbrio térmico e convectivo.

O comportamento das curvas dos modelos de equilíbrio térmico e convectivo são os que melhor representam o processo de secagem no interior da partícula, já que a temperatura tende a ficar constante em 100°C até processo de evaporação no interior da partícula terminar, quando enfim a temperatura volta a aumentar rapidamente em pouco tempo, até um ponto em que a taxa de crescimento de temperatura retarda, neste ponto inicia-se o processo de desvolatilização no interior da partícula, que diminui a taxa de aquecimento da partícula devido à decomposição endotérmica da biomassa.

Verifica-se por meio da curva das Figuras (6.14) e (6.15) que mesmo após o término do processo de secagem no interior da partícula em ambos modelos, que ainda há conversão de massa, isso reforça a presença do processo pirólise em sobreposição com o processo de secagem, onde a partícula tende a perder massa devido o processo de desvolatilização.

A Figura (6.17) apresenta a comparação da variação de temperatura média na superfície da partícula em função do tempo dos três modelos propostos.

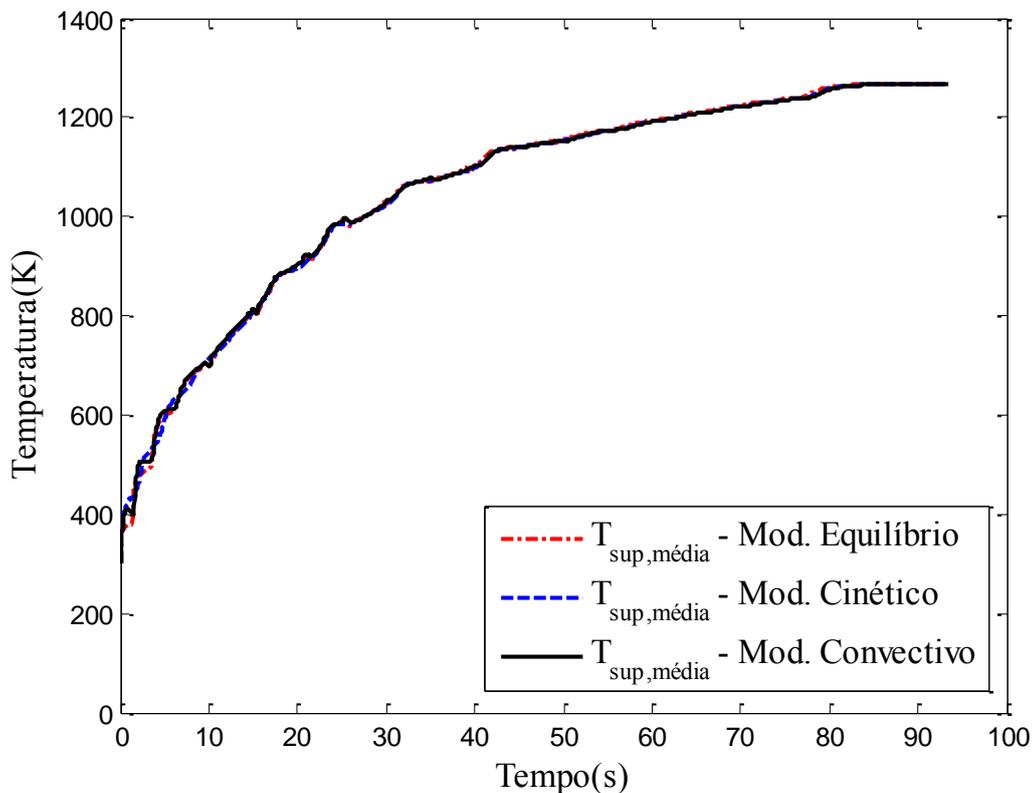


Figura 6.17 - Comparação curvas de temperatura média na superfície da partícula em função do tempo

Visualiza-se por meio da Fig. (6.17) uma excelente convergência entre as três curvas simuladas para predição da temperatura média na superfície da partícula, sendo que a temperatura média da superfície da partícula aumenta rapidamente (entre 0 e 40 segundos) em ambas curvas até chegar em um ponto de certa linearidade (40s), sendo que a partir daquele ponto as variações de temperatura são muito pequenas.

Na Figura (6.18) é apresentado o tempo de CPU gasto nas simulações, em horas, versus modelo de evaporação. O modelo cinético necessita de menos tempo para a simulação, Já o convectivo é o mais dispendioso neste quesito

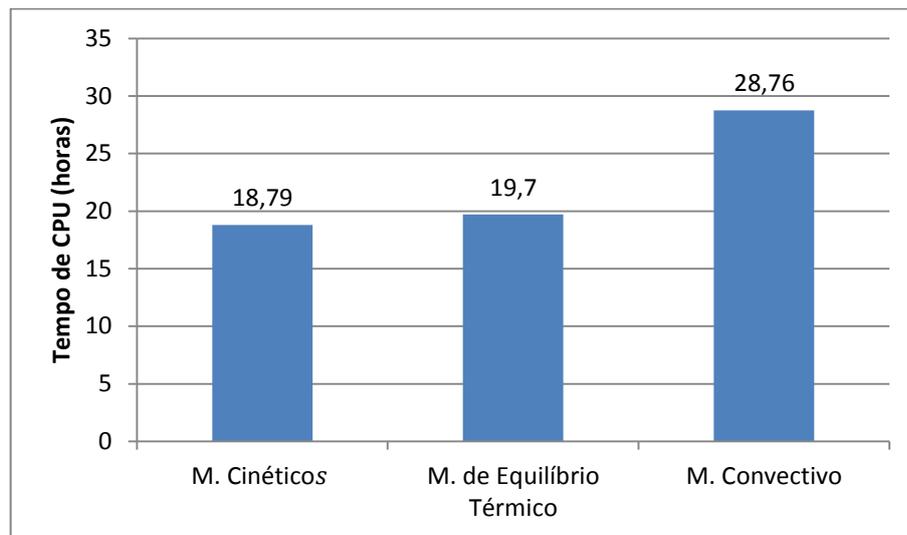


Figura 6.18 - Tempo de CPU gasto nas simulações

7. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

A modelagem matemática do processo de secagem de partícula de biomassa em temperaturas típicas de combustão foi apresentada neste trabalho. O modelo foi baseado principalmente nas equações de conservação da massa, conservação de espécies químicas, conservação da energia e conservação de quantidade de movimento. Três modelos diferentes para conversão de umidade em vapor também foram apresentados: modelo cinético, modelo de equilíbrio térmico e modelo convectivo.

Os três modelos de secagem utilizados nas simulações apresentaram boa previsão de conversão de massa. As previsões dos perfis de temperatura dos modelos também foram fisicamente coerentes com o processo físico real. Foram identificadas nas curvas de temperatura no interior da partícula características do processo de secagem real. O modelo cinético foi o que necessitou de menos tempo de CPU para a simulação, porém este possui limitações físicas por considerar que a secagem depende apenas da temperatura. O modelo de equilíbrio térmico tem uma base física mais consistente que o modelo cinético, porém necessita que as fases estejam em equilíbrio térmico para que os resultados sejam bons, o que não ocorre para os primeiros instantes da secagem. Aparentemente o modelo convectivo seria o mais adequado para representar o fenômeno de secagem de partículas de biomassa em temperaturas típicas de combustão. Entre os três modelos apresentados, este é o único que considera que a taxa de evaporação depende da concentração de umidade na partícula e no meio que esta está imersa, e que por isso também pode prevê recondensação, porém tem como desvantagem o tempo de processamento da simulação, sendo este maior entre os três.

Como sugestões para trabalhos futuros, se propõem:

- Simular novos casos com novas fontes de medições experimentais, devido à incerteza existente nos dados experimentais obtidos na literatura atual.
- Considerar o encolhimento da partícula, para verificar a influência deste fenômeno nos perfis térmicos.
- Considerar a secagem com combustão.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Alves S, Figueiredo JL (1989). “A model for pyrolysis of wet wood”. *Chemical Engineering Science* 44:2861–9.
- Atkinson, B. and Merrick, D. (1983). “Mathematical Models of the Thermal Decomposition of Coal: 4”. *Heat Transfer and Temperature Profiles in a Coke-oven Charge. Fuel* 62: p. 553-561.
- Azevedo, J.L.T. (1994), "Modelação Física e Simulação Numérica de Sistemas de Queima de Combustíveis Sólidos", Tese de doutoramento, Instituto Superior Técnico.
- Babalís, S.J., Belessiotis, V.G (2004). “Influence of the drying conditions on the drying constants and moisture diffusivity during the thin-layer drying of figs”, *Journal of Food Engineering* 65 449–458.
- Balaban M.; Pigott G. M.. Mathematical model of simultaneous heat and mass transfer in food with dimensional changes and variable transport parameters. *Journal of Food Science*, 53(3):935–939, 1988
- Belderok, H.J.M. (2007). “Experimental investigation and modeling of the pyrolysis of biomass”, master thesis, Eindhoven University of Technology.
- Bellais, M. (2007). “Modelling of the pyrolysis of large wood particles”, Doctoral Thesis, Division of Chemical Technology, Department of Chemical Engineering and Technology, KTH – Royal Institute of Technology.
- Bezzon, G. (1998). “Avaliação de possíveis impactos energéticos e ambientais derivados da introdução de novas tecnologias, para a obtenção eficiente de carvão vegetal e carvão ativado”, Tese de Doutorado, Faculdade de Engenharia Mecânica- UNICAMP, Planejamento de Sistemas Energéticos, Campinas, São Paulo, Brasil.
- Bilbao, C.H. (1996). “Modelling of the pyrolysis of wet wood” In: *Fuel*, 23, 1211-1232.
- Bird, R.B., Stewart, W.E. and Lightfoot, E.N. (2001). “Transport Phenomena”, Second Edition, John Wiley & Sons. ISBN 0-471-41077-2.
- Borman, G. L., Ragland, K. W. (1998). “Combustion Engineering”, McGraw-Hill, USA.
- Brasil (2012). Ministério de Minas e Energia. Balanço Energético Nacional 2012. Brasília: MME, 212p.
- Bridgwater, A.V (1991). “Review of Thermochemical Biomass Conversion”. Energy Research Group, Aston university, Birmingham, Crown Copyright, 76p.
- Brooker, D.B.; Bakker-Adkema, F.W. e Hall, C (1995). “Drying and storage of grains and oilseeds”. Editora Van Nostrand Reinhold. 450 páginas.
- Bryden, K. M., Hagge, M. J. (2003). “Modeling the combined impact of moisture and char shrinkage on the pyrolysis of a biomass particle.” In: *Fuel*, 82, 1633-1644.
- Bryden, K.M., Ragland K.W., and Rutland C.J. (2002). “Modeling thermally thick pyrolysis of wood”. *Biomass and Bioenergy*, 22(1):41–53.

- Carrasco, F. (1993). "The evaluation of kinetic parameters from thermogravimetric data: comparison between established methods and the general analytical equation". *Thermochimica Acta*. 213:115–134.
- Cenkowski S, Jayan D.S., Pabis S (1993). "Deep bed grain drying: a review of particular theories" *Drying Technology* 11(7):1553–81.
- Chan WR., Kelbon M., Krieger B.B. (1985). "Modeling and experimental verification of physical and chemical processes during pyrolysis of a large biomass particle". *Fuel* 64:1505–13.
- Collazo J., Porteiro J., Patino D., Granada E (2012). Numerical modeling of the combustion of densified wood under fixed-bed conditions. *Fuel* 93 149–159.
- Cortez, Luís A. B., Lora, Electo E. S., Gomez, Edgard O. (2008). "Biomassa para energia". Campinas, SP: Editora Unicamp.
- Crevasco, M.A. (2002). "Fundamentos de transferência de massa". 2a edição. Campinas: Unicamp.
- Curtiss, C. F. and Hirschfelder, J. O. (1952). "Integration of Stiff Equations". *Proc. Nat. Acad. Sci.*, vol. 38, pp.235-243.
- Cunha, Fábio A. da (2010). "Modelo matemático para estudo de processos reativos de partículas de carvão e biomassa". Faculdade de Tecnologia, Departamento de Engenharia Mecânica, UnB, Mecânica dos fluidos, Brasília, Distrito Federal, Brasil.
- Demirbas, A. 2006. Energy priorities and new energy strategies. *Energy Edu. Sci. Technol.* 16:53–109.
- Di Blasi, C. (1997). Simultaneous heat, mass and momentum transfer during biomass drying. In A.V. Bridgwater and D.G.B. Boocock, editors, *Developments in Thermochemical Biomass Conversion*, volume 1. Blackie A & P, London.
- Di Blasi, C. (2008). "Modeling chemical and physical processes of wood and biomass pyrolysis." In: *Progress in Energy and Combustion Science*, 34, 47-90.
- Gadiou, R., Bouzidi, Y., Prado, G. (2002). "The devolatilization of milimetre sized coal particles at high heating rate: the influence of pressure on the structure and reactivity of the char". *Fuel*. 81:2121–2130.
- Hall, D. O. (1995). "Biomass energy development and carbon dioxide mitigation options". International Conference on National Action to Mitigate Global Climate Change. Copenhagen. Disponível em <<http://unepriaoe.org/CopenhagenConf/>>. Acesso em 22 mai., 2013.
- Hong Lu (2006). "Experimental and Modeling Investigations of Biomass Particle Combustion", Doctoral Thesis, Department Chemical Engineering, Brigham Young University.
- Jenkins, B.M., Baxter, L.L., Miles, T.R., Miles, T.R. (1998). "Combustion properties of biomass". *Fuel Processing Technology*. 54:17–46.
- Krabbenhoft, K. (2003). "Moisture Transport in Wood", Doctoral Thesis, Department of Civil Engineering, Technical University of Denmark.

- Krieger-Brockett, Glaister, DS (1988). Wood devolatilization—sensitivity to feed properties and process variables. In: Bridgewater AV, editor. International Conference on Research in Thermochemical Biomass Conversion, p. S127–42
- Krishna, R., Wesselingh, J. (1996), “The Maxwell-Stefan approach to mass transfer.” In: Chemical Engineering Science, 52, 861-911.
- Larfeldt J., Leckner B., and Melaaen M.C (2000). Modelling and measurements of the pyrolysis of large wood particles. Fuel, 79(13):1637–1643.
- Lee, J. (1997). Biological conversion of lignocellulosic biomass to ethanol. Journal of Biotechnology, v. 56, p. 1-24.
- Morvan D., Meradji S., Accary G (2009). “Physical modeling of fire spread in grasslands”. Fire Safety Journal 44 50–61.
- Nasa (2013). Arquivos termoquímicos. Disponível em: http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/version30/files30/thermo30.dat.
- Nield, D. A., Bejan, A. (2006). “Convection in Porous Media”, 3 ed, Springer, New York.
- Órfão, J. J. M.; Antunes, F. J. A.; Figueiredo, J. L. Pyrolysis kinetics of lignocellulosic materials-three independent reactions model. Fuel, London, v.78, p.349-358, 1999
- Ouelhazi N, Arnaud G, Fohr JP (1992). “A two-dimensional study of wood plank drying. The effect of gaseous pressure below the boiling point”. Transport in Porous Media; 7:39–61.
- Palchonok G. (1998). “Heat and mass transfer to a single particle in fluidized bed”. PhD thesis, Department of Energy Conversion, Chalmers University of Technology, Sweden.
- Patankar, S. V. (1980). Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere-McGraw-Hill, Washington, DC.
- Pereira Jr., N.; Couto, M.A.P.G.; Santa, L.M.M. (2008). “Biomass of lignocellulosic composition for fuel ethanol production and the context of biorefinery”. In Series on Biotechnology, Ed. Amiga Digital UFRJ, Rio de Janeiro, v.2, 45 p.
- Peters B., Schoder E., Bruch C., Nussbaumer T. (2002), Biomass Bioenergy 23 291–306.
- Pinheiro P. C., Raad T. J., Yoshida M. I. (1998), “Model a process for drying Eucalyptus spp at high temperatures”. Bras. J. Chem. Eng. Vol 15 n.4 São Paulo.
- Porteiro J., Granada E., Collazo J., Patino D., Moran C. (2007), “A model for the combustion of large particles of densified wood”. Energy & Fuels, 21, 3151–3159.
- Purlis E.; Salvadori V. O. Bread baking as a moving boundary problem, part 2: Model validation and numerical simulation. Food Engineering, 91(3):434–442, 2009.
- Radmanesh, Y. Courbariaux, J. Chaouki, and C. Guy. A unified lumped approach in kinetic modeling of biomass pyrolysis. Fuel, 85:1211 – 1220, 2006.
- Ragland, K. W., Aerts, D. J. (1991). “Properties of Wood for Combustion Analysis.” In Bioresource Technology, 37, 161-168.

- Reina, J.; Velo, E.; Puigjaner, L. (2000). "Predicting the minimum fluidization velocity of polydisperse mixtures of scrap-wood particles". *Power Technology*, v. 111, p. 245-251.
- Reynolds W.C., 1979, "Thermodynamic properties in SI. Graphs, tables and computational equations for 40 substances", Stanfor Univ. Press.
- Shin D, Choi S (2000). "The combustion of simulated waste particle in a fixed bed". *Combustion and Flame*, Vol. 121., p.167-180.
- Simmons W. (1983). "Analysis of single particle wood combustion in convective". Bow.Ph. D.thesis, University of Wisconsin-Madison.
- Souza, O.; Schulz, M.A.; Fischer, G.A.A.; Wagner, T.M.; Sellin, N. (2012), "Energia alternativa de biomassa: bioetanol a partir da casca e da polpa de banana". *Rev. Bras. Eng. Agríc. Ambient.* vol.16, nº.8, Campina Grande.
- Spreutels L., Debaste F., Legros R., Haut B. (2013), "Experimental characterization and modeling of Baker's yeast pellet drying". *Food Research International*, 52, 275-287.
- Taylor, R. L. (2002). *The Finite Element Method*. 5th. Oxford: Butterworth-Heinemann.
- Thunman, Henrik (2004), "Biofuel Combustion", Department of Energy Conversion, Chalmers University of Technology, Göteborg.
- Turns, S. R. (2004). "An Introduction to Combustion", Mcgraw-Hill, USA.
- Viskanta, R. (2005). "Combustion and Heat Transfer in Inert Porous Media." In: *Handbook of Porous Media*, 2^a ed, CRC Press: Taylor & Francis Group, Boca Raton.
- Wakao, N., and Kaguei, S. *Heat and Mass Transfer in Packed Beds*, Gordon & Breach, London, 1982.
- Whitaker, S. (2005). "Coupled, Nonlinear Mass Transfer and Heterogeneous Reaction in Porous Media." In: *Handbook of Porous Media*, 2^a ed, CRC Press: Taylor & Francis Group, Boca Raton.
- Yang Y.B., Newman R., Charifi V., Swithenbank J., Ariss. (2007). "Mathematical modeling of straw combustion in a 38 MWe power plant furnace and effect of operating conditions", *Fuel* 86, 129-142.
- Yang Y.B., Charifi V.N., Swithenbank J., Ma L., Darvell L.I., Jones J.M. (2008), "Combustion of a single particle of biomassa", *Energy Fuels* 22 306–316.
- Zhang, J., Smith, K.R. (2007). "House hold air pollution from coal and biomass fuels in China: Measurements, health impacts, and interventions". *Environ Health Perspect*, v. 115, n. 6, p. 848–855.
- Zhou H., Jensen A.D., Glaborg P., Jensen P.A., Kavaliauskas A., 2005. "Numerical modeling of straw combustion in a fixed bed", *Fuel* 84, 389-403.