



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
ENG07053 - TRABALHO DE DIPLOMAÇÃO EM ENGENHARIA
QUÍMICA



Estudo de distribuidores para reatores de pirólise utilizando fluidodinâmica computacional

Autor: Eduardo Yatudo de Oliveira

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Farenzena

Co-Orientador: Prof. Dr. Luis A. R. Muniz

Sumário

Sumário	ii
Agradecimentos	iii
Resumo	iv
Lista de Figuras	v
Lista de Tabelas	vii
Lista de Símbolos	viii
Lista de Abreviaturas e Siglas	x
1 Introdução	1
2 Revisão Bibliográfica	3
2.1 Transformação da biomassa para a produção de energia	3
2.1.1 Tipos de pirólise e seus produtos	4
2.2 Reatores de pirólise rápida	6
2.2.1 Reatores de leito fluidizado e condições de operação	7
2.3 Simulação de reatores de pirólise rápida	11
2.4 Distribuidores para leitos fluidizados	13
2.4.1 Tipos de distribuidores	14
3 Materiais e Métodos	15
3.1 O COMSOL	15
3.2 Modelo matemático utilizado no distribuidor de leito poroso	15
3.3 Modelo matemático utilizado no distribuidor de pratos perfurados	17
4 Formulação do Problema ou Estudo de Caso	18
4.1 Estudo do reator de pirólise experimental	18
4.2 Estudo dos distribuidores de pratos perfurados	21
5 Resultados	25
5.1 Simulação do distribuidor de leito poroso	25
5.2 Simulação do distribuidor de pratos perfurados	27
6 Conclusões e Trabalhos Futuros	30
7 Referências	31

Agradecimentos

Agradeço primeiramente aos professores do DEQUI, que sempre estiveram disponíveis para me ajudar.

Um agradecimento especial ao meu orientador, o professor Farenzena e ao meu co-orientador, o professor pós-doutorando do DEQUI Luis Muniz. Ambos sempre me ajudaram durante a produção deste trabalho.

À minha família que sempre me apoiou durante esta árdua caminhada.

A Vanessa, minha namorada e companheira que esteve ao meu lado nos momentos de alegria e de dificuldade, sempre me prestando apoio e carinho.

Aos amigos que me ajudaram a descontraír quando eu estive muito preocupado.

E aos amigos da faculdade, que nunca serão esquecidos, mais conhecidos como a RAÇA.

Resumo

O presente trabalho visa aplicar a ferramenta computacional COMSOL para a simulação de distribuidores de reatores de pirólise rápida do tipo leito fluidizado. Inicialmente é realizada uma revisão bibliográfica no Capítulo 2, discorrendo sobre a importância da biomassa para a produção de energia, a transformação da biomassa através da pirólise, os tipos de pirólise existentes e seus produtos. Em seguida no Capítulo 3 é discutida a metodologia utilizada, sendo introduzido o COMSOL e as equações utilizadas para resolver o problema. No seguinte Capítulo são apresentados os tipos de distribuidores a serem simulados no COMSOL. Foi estudado um distribuidor de vidro sinterizado e um distribuidor de pratos perfurados. No capítulo 5 é feita a validação de dados para a simulação do leito poroso e foram comparadas diversas geometrias de placas perfuradas, sendo estas comparadas entre si para se determinar qual possuía o comportamento mais adequado para o bom funcionamento do leito poroso. Por fim, no último capítulo são apresentadas as conclusões do estudo e conclui-se que o COMSOL pode ser uma promissora ferramenta de estudo de distribuidores para reatores de pirólise rápida.

Lista de Figuras

Figura 2.1: Esquema de produtos obtidos através da conversão térmica da biomassa. Extraído de Bridgwater (2011).	4
Figura 2.2: Geometria de um reator de pirólise rápida utilizando leito fluidizado. Retirado de Choi, Choi et al. (2011)	8
Figura 2.3: Conversão no reator em função do tamanho da partícula de biomassa alimentada. Extraído de Choi, Choi et al. (2011).....	9
Figura 2.4: Conversão no reator em função da vazão de alimentação. Retirado de Choi, Choi et al. (2011)	9
Figura 2.5: Conversão no reator em função da vazão de gás inerte. Retirado de Choi, Choi et al. (2011).....	10
Figura 2.6: Conversão no reator em função da temperatura de resfriamento dos produtos. Retirado de Choi, Choi et al. (2011).....	10
Figura 2.7: Conversão no reator em função da temperatura de aquecimento. Retirado de Choi, Choi et al. (2011)	11
Reação de pirólise proposta por Boateng e Mtui (2012).	11
Figura 2.9: Fração mássica de bio-óleo no reator simulado. Retirado de Boateng e Mtui (2012).....	12
Figura 2.10: Fração mássica de produto em função do tempo e da posição radial. Extraído de Papadikis, Gu et al. (2009)	13
Figura 2.11: Distribuidor do tipo placa perfurada. Yang (1999)	14
Figura 2.12: Distribuidor do tipo <i>bubble cap</i> . Yang (1999)	14
Figura 4.1: Reator de pirólise rápida presente no GIMSCOP (dimensões em mm).....	18
Figura 4.2: Reator de pirólise rápida com distribuidor do tipo placa porosa montado no COMSOL.....	19
Figura 4.3: Malha demonstrando a discretização realizada no comprimento de entrada do reator.....	20
Figura 4.4: Reator de pirólise rápida com distribuidor do tipo prato perfurado montado no COMSOL.....	22
Figura 4.5: Vista superior da geometria de prato de 84 orifícios utilizado nas simulações.	22
Figura 4.6: Vista superior da geometria de prato de 120 orifícios utilizado nas simulações.	23
Figura 4.7: Detalhe da malha utilizada na discretização do domínio.	23
Figura 4.8: Detalhe da malha no orifício do prato perfurado.	23
Figura 5.1: Perda de carga experimental no reator em função da velocidade de entrada no reator.....	25
Figura 5.2: Magnitude da velocidade em função da posição no reator. Vazão de 7 L/min.	26

Figura 5.3: Magnitude da velocidade em função da posição do reator para o distribuidor de 84 orifícios. 27

Figura 5.4: Magnitude da velocidade em função da posição no reator quando aumentada em 20% a vazão. 28

Figura 5.5: Magnitude da velocidade em função da posição no reator para o distribuidor de 120 orifícios. 28

Lista de Tabelas

Tabela 2.1: Características do bio-óleo. Extraído de Bridgwater (2011)	6
Tabela 2.2: Validação dos resultados da simulação.Extraído de Boateng and Mtui (2012)	12
Tabela 4.1: Valores de perda de carga em função da vazão.	19
Tabela 4.2: Valores das velocidades de entrada no reator.....	21
Tabela 5.1: Validação dos resultados obtidos no COMSOL.	26

Lista de Símbolos

ρ – Tensor da pressão (Pa/m²)

t – Tempo (s)

u – Vetor da velocidade (m/s)

∇ – Operador nabla (1/m)

ρ – Massa específica (kg/m³)

τ – Tensor das forças viscosas (N/m²)

F – Forças diversas presentes no escoamento (N/m³)

μ – Viscosidade (Pa.s)

g – Aceleração da gravidade (m/s²)

Q_{br} – Fonte de massa (kg/m³.s)

ε_p – Porosidade

k_{br} – Permeabilidade do meio (m²)

β_f – Coeficiente de Forchheimer (kg/m⁴)

ΔP_{grid} – Perda de carga no distribuidor (Pa)

ΔP_{bed} – Perda de carga no leito (Pa)

U_h – Velocidade através do orifício (m/s)

C_d – Coeficiente de descarga

Q – Vazão através do distribuidor (kg/m³)

N – Número de perfurações no distribuidor

d – Diâmetro da perfurações (m)

L_H – Espaçamento entre as perfurações

N_d – Número de perfurações por metro quadrado (1/m²)

$\rho_{\text{água}}$ – Massa específica da água (kg/m³)

h – Altura de água (m)

ΔP – Perda de carga experimental (Pa)

μ_{ar} – Viscosidade do ar (Pa.s)

ρ_{ar} – Massa específica do ar (kg/m³)

d_p - Diâmetro da partícula de areia (m)

u_f - Velocidade mínima de fluidização (m/s)

v - Módulo da velocidade do fluido (m/s)

Lista de Abreviaturas e Siglas

GIMSCOP - Grupo de Intensificação, Modelagem, Simulação, Controle e Otimização de Processos

DEQUI – Departamento de Engenharia Química

RANS – *Reynolds Averaged Navier-Stokes*

1 Introdução

Devido à crescente preocupação com o impacto causado por combustíveis fósseis, novas fontes de energia são buscadas, sendo as de principal destaque as fontes de energia renováveis. Os combustíveis fósseis quando queimados liberam de forma não sustentável dióxido de carbono na atmosfera, sendo este o principal gás relacionado ao efeito estufa, e por esse motivo são estudadas formas de substituir esses combustíveis. O uso de biomassa para substituir combustíveis fósseis na geração de calor é uma alternativa sustentável, pois todo o dióxido de carbono produzido pelo consumo de biomassa é absorvido por plantas, que eventualmente poderão ser utilizadas para queima, formando um ciclo.

Dentro desse cenário de necessidade de novas tecnologias mais limpas para a produção de energia, as tecnologias relacionadas à transformação da biomassa têm recebido bastante atenção. Existem diversas rotas para a transformação da biomassa, entre elas a transformação térmica e dentro deste processo está a pirólise, que tem sido fonte de diversos estudos. A pirólise é um processo que há muito tempo é utilizado pela humanidade, sendo processada desde tempos remotos principalmente para a produção de carvão vegetal a partir da queima lenta de madeira. Entretanto somente a partir da década de 1980 pesquisas começaram a mostrar que, realizando a reação de pirólise em tempos mais curtos e com altas taxas de transferência de calor, era possível obter um líquido escuro que possuía metade do poder calorífico dos óleos combustíveis fósseis. Este líquido escuro recebeu o nome de bio-óleo e apresenta vantagens em relação ao carvão, pois possui formas de transporte, armazenamento e uso mais flexíveis que o carvão vegetal. Por este motivo, o estudo da pirólise rápida tem se intensificado.

Por causa da complexidade dos processos envolvidos com a pirólise rápida, muitos tipos de reatores são propostos para a reação. Entre as principais configurações utilizadas pode-se citar a de leito fluidizado com partículas de areia, que é muito utilizada por possuir: simples construção, bom controle de temperatura e ótimas taxas de transferência de calor para a biomassa. Porém essas características só são garantidas por bons distribuidores, que são pratos no fundo do reator que além de terem a função de sustentar o leito quando parado, precisam garantir que a entrada de ar seja bem distribuída para evitar que haja, por exemplo, partículas com diferentes tempos de residência e má distribuição de temperaturas. É muito importante evitar esses problemas, pois a reação de pirólise rápida é muito sensível a variações de temperatura e de tempos de residência. Isto pode gerar como consequência baixa conversão de líquidos, o que é indesejado.

O objetivo do presente trabalho é aplicar o *software* COMSOL como possível ferramenta de simulação de escoamento através de distribuidores de reatores de leito fluidizado utilizados para a pirólise rápida. No estudo realizado, foram realizadas duas simulações. No primeiro estudo foi simulado o escoamento de ar através de um distribuidor do tipo leito poroso, obtendo-se o perfil de velocidade do ar através do reator, que continha apenas o distribuidor no seu interior. No segundo caso, foi estudado o escoamento de ar através de um distribuidor de pratos perfurados, resultando também em um perfil de velocidades para o ar no interior do reator. Por fim, foi realizada uma

comparação entre os escoamentos no interior dos reatores, a fim de determinar a qualidade dos distribuidores.

A principal motivação deste trabalho é intensificar o uso de ferramentas computacionais na predição do comportamento de um reator de pirólise rápida. Por este processo ser complexo e envolver muitos parâmetros, a fluidodinâmica computacional se tornou fundamental no desenvolvimento e aprimoramento de reatores de pirólise rápida de escala industrial.

A estrutura do trabalho está assim dividida: primeiramente é apresentada a revisão bibliográfica, que discorre sobre a transformação de biomassa em bio-óleo, as características de um reator de pirólise rápida, o desenvolvimento de simulações para esses reatores e a aplicação de distribuidores em reatores de leito fluidizado. Em seguida é descrita a metodologia utilizada, apresentando o COMSOL e demonstrando as equações utilizadas para a simulação dos casos a serem estudados. A próxima seção discorre sobre como foram montados as simulações e o valor dos parâmetros inseridos na simulação. A penúltima seção apresenta os resultados e discussões sobre as simulações obtidas. Por fim são apresentadas as principais conclusões obtidas no percurso do trabalho.

2 Revisão Bibliográfica

2.1 Transformação da biomassa para a produção de energia

Em Serdar (2004), biomassa é definida como qualquer tipo de matéria orgânica de formação recente que seja composta de carbono, hidrogênio, oxigênio, nitrogênio e, em quantidades mínimas (quando comparado a combustíveis fósseis), enxofre. Alguns tipos de biomassa ainda podem conter consideráveis quantidades de elementos inorgânicos como potássio, sódio, cálcio etc. Normalmente, a biomassa utilizada para a produção de energia é composta por rejeitos orgânicos produzidos por atividades humanas como: resíduos orgânicos industriais e domésticos, bagaço de plantas, cavaco de madeira etc.

Segundo Saxena et al. (2009), as vantagens existentes no uso da biomassa para a produção de energia em detrimento a fontes fósseis são:

- A biomassa é uma fonte de energia renovável, potencialmente sustentável ao contrário do petróleo, que é um recurso escasso.
- O aumento da participação da biomassa na matriz energética proporcionaria uma redução no consumo de petróleo, aumentando a sobrevida do petróleo, que é um insumo importante para várias indústrias.
- A biomassa gera uma quantidade muito pequena de dióxido de enxofre, evitando as chuvas ácidas.
- A cinza produzida por combustões pode ser utilizada para fertilização de solos.
- Redução de áreas de disposição de lixo orgânico, pois este pode ser utilizado como fonte de energia.
- A princípio, por ser subproduto da atividade humana, a biomassa utilizada para a produção de energia não está sujeita a influências do mercado global.

O processo de queimar a biomassa com o objetivo de obter calor tem sido utilizado por séculos pela sociedade, porém quando se propõe seu uso para atividades industriais ou de larga escala, a queima direta de biomassa apresenta alguns empecilhos sérios como problemas de transporte devido à baixa densidade da massa orgânica, que causa aumento nos gastos com transporte, e problemas na combustão por sua alta umidade, que torna a combustão irregular ou até inviável. Portanto, para tornar o consumo de biomassa viável para fins de produção energética, ela precisa ser processada para se tornar um produto de mais fácil transporte e que possua uma combustão mais padronizada, independentemente da matéria orgânica.

Entre os métodos de melhoramento da biomassa podem-se citar principalmente os métodos biológicos, físicos e térmicos.

De acordo com Saxena et al. (2009), o método biológico é baseado na conversão da biomassa em produtos orgânicos oxigenados como álcool através de processos biológicos como fermentação ou fotossíntese. Um exemplo de transformação da biomassa através de um processo biológico é a transformação da cana-de-açúcar em etanol através da fermentação de leveduras.

Segundo *Serdar (2004)*, o método físico consiste principalmente em misturar biomassa com algum tipo de combustível fóssil, geralmente carvão, produzindo um briquete. A biomassa presente no briquete aumenta a taxa de consumo de carvões de baixa qualidade. Isto ocorre porque combustão é facilitada, já que a biomassa seca no interior do briquete queima facilmente, produzindo energia suficiente para a combustão do carvão.

Em *Bridgwater e Peacocke (2000)* são definidos os três principais métodos térmicos de utilização de biomassa para a produção de energia. Os processos de conversão térmica citados são: a combustão, a gaseificação e a pirólise. A combustão direta que fornece calor para a produção de vapor, que eventualmente resulta na produção de energia elétrica. *Mohan et al. (2006)* define a gaseificação como um processo onde a biomassa é decomposta em gás de síntese através de uma reação cuja presença de oxigênio é cuidadosamente controlada. Conforme a figura 2.1, o gás de síntese pode ser utilizado tanto para a produção de energia quanto para a produção de outros produtos químicos. A última alternativa apresentada, a pirólise, produz um combustível líquido que pode substituir o combustível fóssil em diversas aplicações. Há uma produção menor de carbono residual e gás combustível.

A vantagem da pirólise rápida é que ela resulta principalmente em um combustível líquido (conhecido como bio-óleo), o que é benéfico quando o local onde a biomassa é produzida localiza-se distante do local onde ela é necessária, já que o bio-óleo pode ser transportado e armazenado de maneira mais fácil do que a biomassa bruta. Ao contrário da pirólise convencional, que é um processo bem conhecido e estabelecido, tendo como exemplo a produção de carvão vegetal, a pirólise rápida ainda é um processo que tem um estudo da cinética em desenvolvimento.

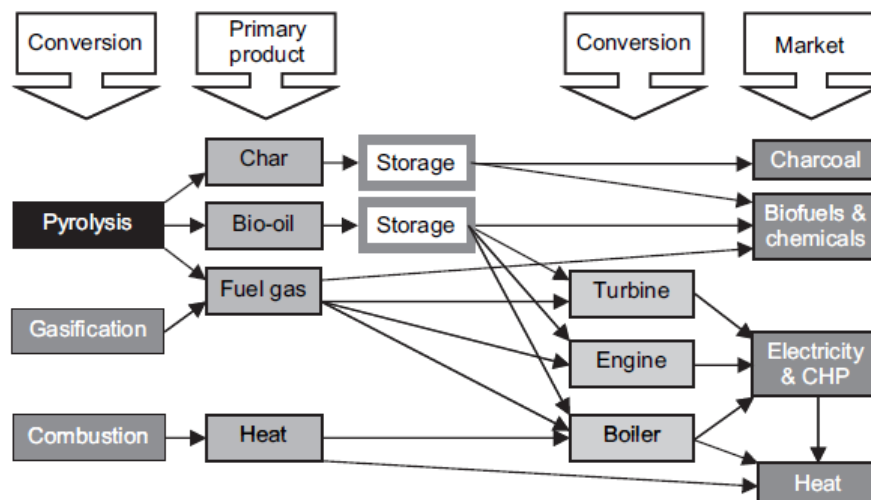


Figura 2.1: Esquema de produtos obtidos através da conversão térmica da biomassa. Extraído de *Bridgwater (2011)*.

2.1.1 Tipos de pirólise e seus produtos

Segundo *Mohan et al. (2006)*, a pirólise pode ser dividida em dois tipos: a pirólise convencional (também conhecida como pirólise lenta) e a rápida, sendo que a diferença entre as duas se dá pelas condições nas quais o processo é realizado. Os termos “pirólise

rápida” e “pirólise lenta” são completamente arbitrários, e não há uma definição clara dos tempos de residência ou taxas de aquecimento para ambos os processos.

A pirólise convencional é utilizada há séculos pela humanidade e seu principal objetivo é obter carvão vegetal. Na pirólise convencional de madeira, por exemplo, a biomassa é aquecida até no máximo 500° C. O tempo de residência da biomassa varia de cinco a trinta minutos. Os materiais voláteis não são retirados rapidamente como na pirólise rápida, portanto a reação térmica continua por um longo tempo, quando comparado com a pirólise rápida. A taxa de aquecimento da reação na pirólise convencional é tipicamente muito menor que a taxa utilizada na pirólise rápida.

A pirólise rápida é um processo a altas taxas de transferência de calor, geralmente maiores que da pirólise convencional, no qual a biomassa é aquecida na ausência de oxigênio. A biomassa se decompõe em vapores, aerossóis e um sólido, composto de carbono residual. Após o resfriamento e condensação dos vapores e aerossóis, um líquido marrom escuro com poder calorífico em torno de metade do óleo combustível advindo do petróleo é formado. O produto gerado tem como composição mássica 60 a 75% de bio-óleo, 15 a 25 % de sólidos e 10 a 20% de gases não condensáveis. Estas variações ocorrem devido à biomassa de alimentação e condições de processo da pirólise (Mohan, Pittman et al. 2006).

É apresentado em Bridgwater (2011) como os princípios da pirólise rápida:

- Taxas de aquecimento e taxas de transferência de calor muito altas na interface da partícula da biomassa, o que requer uma alimentação com partículas finamente moídas.
- Temperatura de reação da pirólise cuidadosamente controlada para valores próximos de 500°C a fim de maximizar a produção de bio-óleo.
- Curto tempo de residência, ficando em torno de 2 segundos, para minimizar reações secundárias.
- Rápida remoção do carvão e resfriamento para minimizar reações no vapor.

O produto de maior interesse na pirólise rápida é o bio-óleo. O bio-óleo é um líquido orgânico com compostos altamente oxigenados. Esse líquido é formado pela rápida e simultânea despolimerização e fragmentação principalmente da celulose, hemicelulose e lignina, que ocorre devido ao rápido aumento da temperatura. O rápido resfriamento do produto paralisa os produtos intermediários da degradação. Esse processo de resfriamento impede que os produtos continuem a reagir, o que aconteceria se as altas temperaturas fossem mantidas. O bio-óleo contém muitas substâncias reativas, que lhe causam instabilidade e grande variação das suas propriedades com o tempo e com a variação da temperatura. O bio-óleo pode ser considerado como uma microemulsão na qual a fase contínua é uma solução aquosa de produtos da degradação da holocelulose, que estabiliza a fase descontínua, cuja composição é de macromoléculas de lignina pirolisada. Essas fases ficam estabilizadas por mecanismos como pontes de hidrogênio. Acredita-se que o envelhecimento e a instabilidade no bio-óleo ocorrem por causa da quebra dessa emulsão (Bridgwater 2011).

A Tabela 2.1 mostra as principais características do bio-óleo, enunciando as causas de tais características e seus efeitos. As características apresentadas são as que mais podem ocasionar problemas na operação de equipamentos que lidem com bio-óleo.

Tabela 2.1: Características do bio-óleo. Extraído de Bridgwater (2011)

Características do bio-óleo	Causa	Efeito
Acidez ou pH baixo	Ácidos orgânicos provenientes da degradação de biopolímeros	Corrosão de vasos e de tubulações
Degradação	Continuação de reações secundárias	Aumento da viscosidade devido a reações secundárias como a condensação Potencial separação de fases
Metais Alcalinos	Geralmente estão presentes no carvão, porém má separação pode levá-los ao líquido	Envenenamento de catalisadores Deposição de sólidos na combustão Erosão e corrosão Danos a turbinas
Carvão	Processo de separação de sólidos incompleto	Degradação do óleo Sedimentação Entupimento de equipamentos
Impróprio para destilação	Mistura reativa dos produtos de degradação	O bio-óleo não pode ser destilado, pois inicia-se degradação vigorosa a partir de 100° C
Alta viscosidade	Composição química do bio-óleo	Alta perda de carga, maior custo com bombeamento Atomização inadequada
Baixa razão de Hidrogênio/Carbono	Alta quantidade de oxigênio presente na biomassa	Dificuldade para extrair hidrocarbonetos Pouca miscibilidade com hidrocarbonetos
Nitrogênio	Oriundo das proteínas presentes na biomassa	Odor desagradável Envenenamento de catalisadores Possível produção de NOx
Quantidade de água presente no produto	Reações da pirólise Água presente na alimentação	Efeitos na viscosidade Aumento do pH Diminuição na capacidade calorífica

2.2 Reatores de pirólise rápida

Segundo Bridgwater (2011), o reator é o principal equipamento no desenvolvimento da pirólise rápida. Apesar de o sistema representar apenas 10 a 15% do total de capital investido no sistema completo de pirólise, a maior parte do estudo e desenvolvimento da pirólise rápida se concentra no teste de diferentes configurações de reatores. Mesmo assim é importante destacar o crescente número de estudos relacionados ao melhoramento do bio-óleo e do sistema de coleta do líquido após a reação.

Em Bridgwater e Peacocke (2000) são definidos os outros processos inerentes ao processo de pirólise da biomassa, fora o reator:

- Secagem da alimentação: Se o material de alimentação não for algo seco como palha, é essencial a remoção de água da alimentação, pois essa água estará presente no produto e quanto mais água, pior as características do bio-óleo. Calor residual do processo pode ser utilizado para a secagem.
- Moagem da biomassa: As partículas devem ser moídas a um tamanho adequado para possibilitar um aquecimento homogêneo e rápido, para

alcançar o máximo de conversão para o bio-óleo. Os valores de diâmetro da partícula mais utilizados variam de 200 μm até 6 mm, dependendo da geometria do reator.

- Sistema de separação de carvão e cinzas: Alguma quantidade de carvão inevitavelmente passa pelo ciclone e contamina o líquido e poderá ser removido através de filtros. Praticamente toda a cinza produzida na reação se encontra junto com o carvão, logo uma efetiva separação do carvão resulta na remoção da cinza também. Esta é uma parte importante do processo, pois como foi comentado anteriormente, o carvão causa reações secundárias no bio-óleo.
- Coleta do líquido: Colher o líquido tem sido uma das maiores dificuldades no processo de pirólise rápida, pois alguns compostos podem causar incrustações na superfície de resfriamento, causando problemas na condensação. A precipitação eletrostática tem se mostrado efetiva na coleta dos aerossóis oriundos da reação.

2.2.1 *Reatores de leito fluidizado e condições de operação*

Os reatores de leito fluidizado formados por leito de partículas de areia têm a vantagem de ser uma tecnologia bem conhecida, tendo como principais características: simples construção e operação, bom controle de temperatura e transferência de calor muito efetiva para as partículas de biomassa. Esse tipo de reator está geralmente ligado a equipamentos de precipitação eletrostática para a coalescência e coleta do líquido proveniente da reação.

A principal desvantagem desse reator é ter que utilizar grandes vazões de gases inertes para manter o leito fluidizado. Isto ocasiona em equipamentos maiores, quando comparado a outras geometrias, o que resulta em custos iniciais maiores. A grande vazão de gás também resulta em baixa pressão parcial dos produtos da reação, o que dificulta o resfriamento dos aerossóis.

Em Choi, Choi et al. (2011) demonstra como as condições de operação de um reator de leito fluidizado interfere no produto resultante da pirólise rápida. O experimento foi realizado no reator apresentado pela Figura 2.2, que também apresenta diversos equipamentos necessários para uma unidade de produção de bio-óleo. A biomassa ingressa pelo silo e passa pelas duas extrusoras de alimentação. A seguir ingressa no reator, que é aquecido por um forno elétrico e, após passar pelo reator, os produtos são separados por um ciclone e por um condensador eletroestático.

As condições alteradas no reator foram: a vazão de gás de aquecimento, temperatura de operação, temperatura de resfriamento dos vapores, vazão de alimentação de biomassa e tamanho das partículas de biomassa.

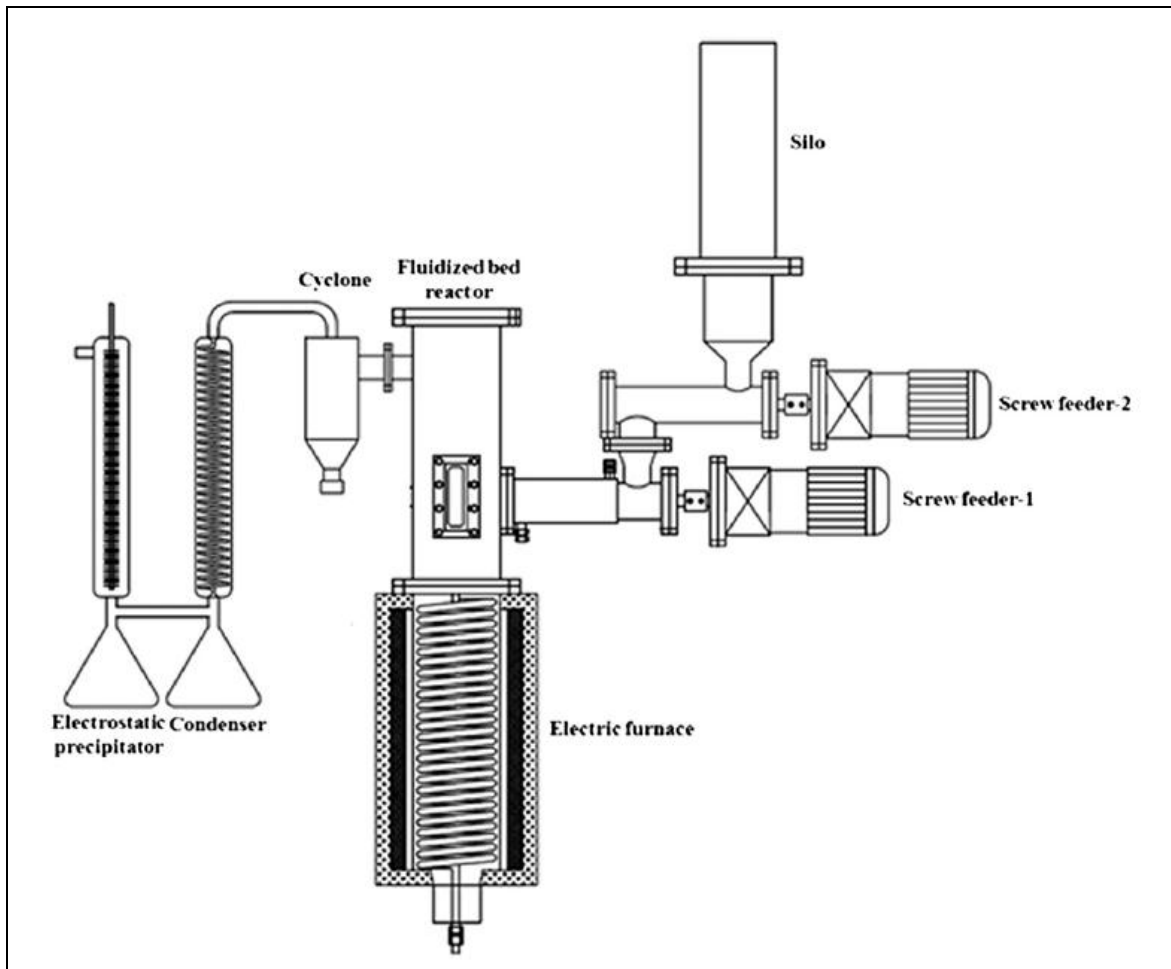


Figura 2.2: Geometria de um reator de pirólise rápida utilizando leito fluidizado. Retirado de Choi et al. (2011)

Para esse reator, foram obtidos os seguintes gráficos alterando as condições de entrada já comentadas.

O aumento do tamanho da partícula como observado da Figura 2.3, causa uma diminuição da produção de bio-óleo. Isso ocorre porque partículas maiores de biomassa dificultam a transferência de calor, criando um gradiente de temperatura interno, o que favorece a formação de carvão. Partículas maiores também colaboram para um aumento do tempo de residência da biomassa no reator, o que resulta em maior número de reações secundárias no bio-óleo, acarretando uma maior produção de gases não condensáveis.

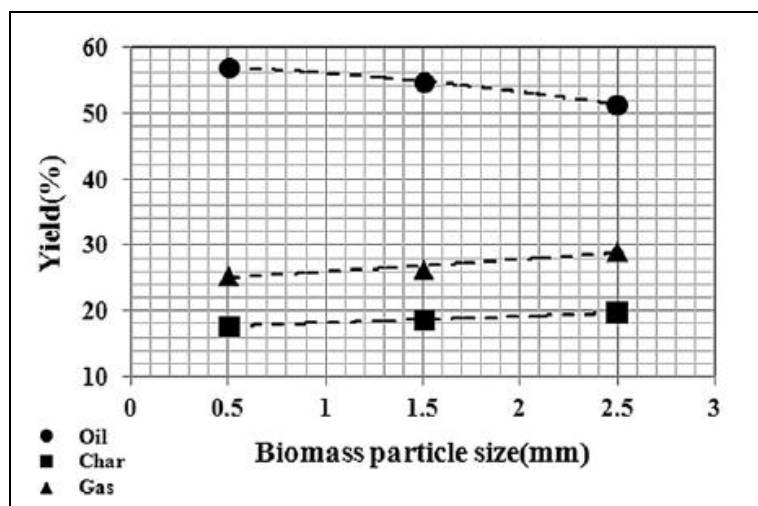


Figura 2.3: Conversão no reator em função do tamanho da partícula de biomassa alimentada. Extraído de Choi et al. (2011)

A Figura 2.4 apresenta a conversão de produtos em função da vazão de alimentação no reator. É observado um pequeno aumento na conversão do bio-óleo e um aumento na conversão de carvão e conseqüentemente uma diminuição na conversão de gás. Isto ocorre principalmente pela redução do tempo de residência da biomassa, que favorece a formação de carvão, e pelas alterações do leito fluidizado, que se torna maior em volume devido à maior quantidade de partículas no seu interior.

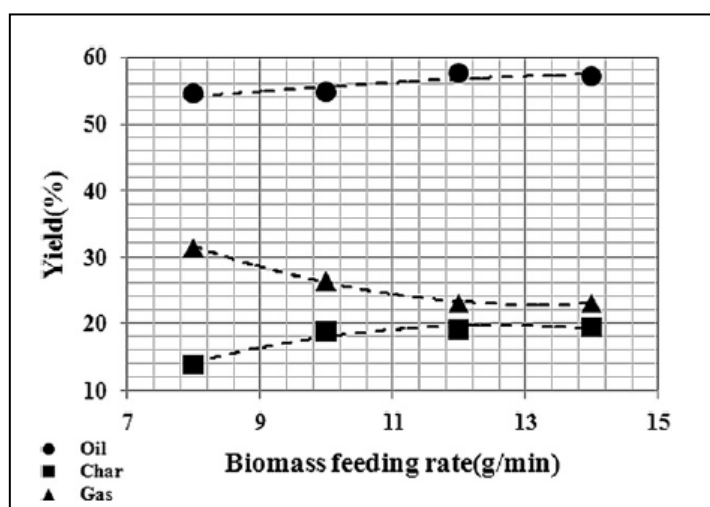


Figura 2.4: Conversão no reator em função da vazão de alimentação. Retirado de Choi et al. (2011)

Na figura 2.5 é possível observar o comportamento da conversão no reator em função da vazão do gás de alimentação. Primeiramente há um aumento sensível na produção de bio-óleo. Isto ocorre porque a maior vazão de nitrogênio leva a melhoramento das condições de leito fluidizado, aumentando a transferência de calor e reduzindo o tempo de residência, que desfavorece a quebra do bio-óleo. Entretanto maiores vazões de nitrogênio implicam bolhas maiores no leito fluidizado prejudicando a transferência de calor e mistura do sólido, resultando numa posterior menor produção de bio-óleo.

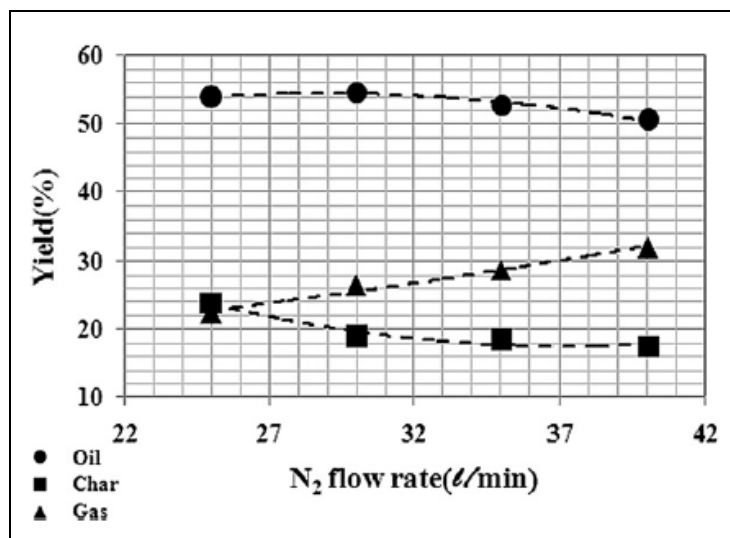


Figura 2.5: Conversão no reator em função da vazão de gás inerte. Retirado de Choi et al. (2011)

A Figura 2.6 apresenta a conversão de produtos em função da temperatura de resfriamento do aerossol resultante do reator. Ocorre uma diminuição da produção de bio-óleo com o aumento da temperatura devido a não ocorrer a condensação de alguns gases que a temperaturas menores condensariam.

A Figura 2.7 demonstra a conversão em função da temperatura de aquecimento do reator. Observa-se um pequeno aumento na produção de bio-óleo, porém conforme a temperatura avança há um decréscimo na conversão. Quanto ao carvão, ocorre comportamento similar. Isso acontece porque a reação de gaseificação é favorecida a temperaturas maiores.

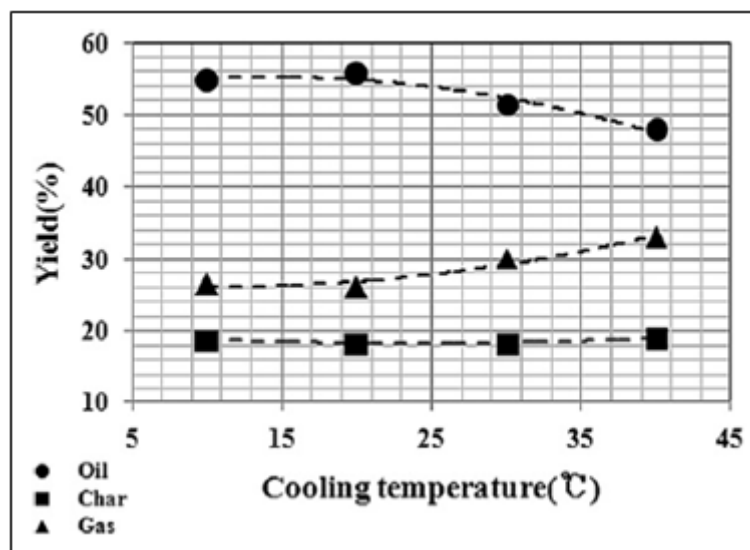


Figura 2.6: Conversão no reator em função da temperatura de resfriamento dos produtos. Retirado de Choi et al. (2011)

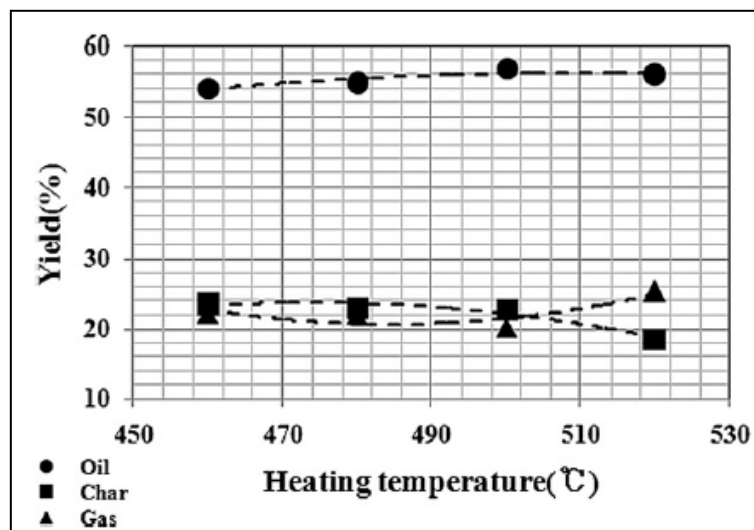


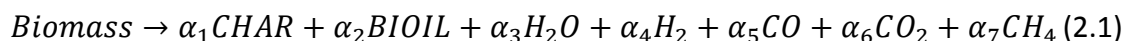
Figura 2.7: Conversão no reator em função da temperatura de aquecimento. Retirado de Choi et al. (2011)

2.3 Simulação de reatores de pirólise rápida

Segundo Boateng e Mtui (2011), o uso de CFD para simular o funcionamento dos reatores de pirólise rápida é muito importante, pois somente esta abordagem pode lidar com tantas variáveis envolvidas no processo como: processos químicos e físicos muito complexos como secagem, volatilização, reações secundárias nos voláteis, oxidação do carvão vegetal combinados com as equações de fluidodinâmica.

No referido estudo (Boateng e Mtui 2011), foi simulado o funcionamento de um reator de pirólise rápida possuindo entrada contínua de biomassa a certa vazão em um leito fluidizado composto por areia. O reator foi dividido em fase gasosa e fase sólida. Para a modelagem da fase gasosa foram consideradas as equações de conservação de massa e quantidade de movimento. Já para a fase sólida, foi necessária a utilização de equações constitutivas, além das equações de conservação de massa e momento. Para o balanço de energia foi considerado o calor recebido por uma partícula de biomassa pelo gás, através da convecção e no interior da partícula foi considerada a condução, onde o coeficiente de transferência de calor por condução foi considerado constante e igual ao da biomassa.

Para a modelagem cinética, foi considerada apenas uma reação de decomposição da biomassa em produtos através da cinética de Arrhenius e segue uma cinética de primeira ordem. A reação foi considerada como uma decomposição direta da biomassa nos diversos produtos possíveis como demonstrado na equação 2.1. Para obterem-se os coeficientes estequiométricos de cada produto (carvão, bio-óleo e gás) foi necessária uma análise da composição gasosa do produto recolhido de um reator experimental.



Reação de pirólise proposta por Boateng e Mtui (2011).

A partir desta modelagem, a simulação gerou os resultados apresentados na Figura 2.9 e Tabela 2.2:

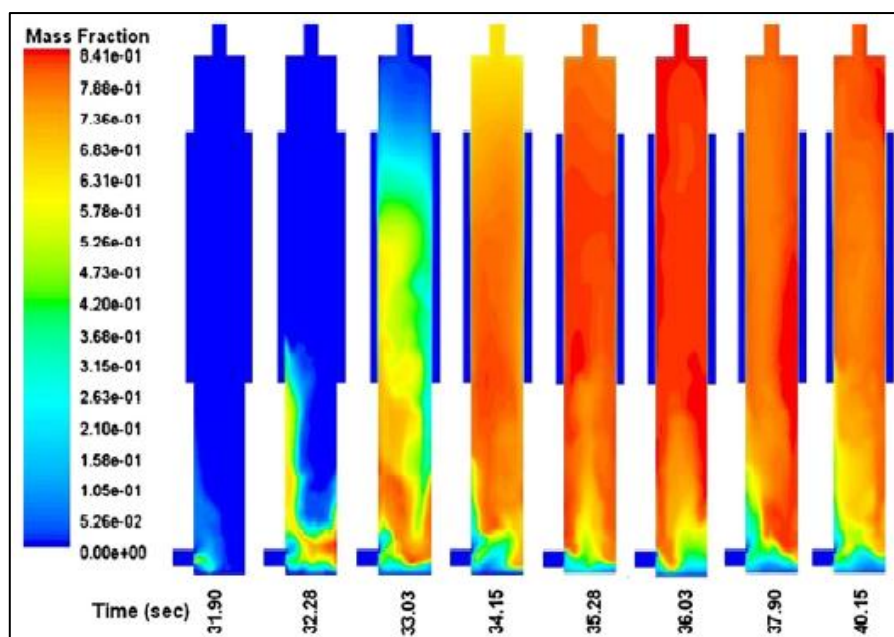


Figura 2.8: Fração mássica de bio-óleo no reator simulado. Retirado de Boateng e Mtui (2011)

Tabela 2.2: Validação dos resultados da simulação. Extraído de Boateng and Mtui (2011)

Produtos	<i>Switchgrass</i>		Espiga de milho		Farelo de soja	
	Modelo	Experimental	Modelo	Experimental	Modelo	Experimental
	Fração Mássica	Fração Mássica	Fração Mássica	Fração Mássica	Fração Mássica	Fração Mássica
Bio-óleo	0,7158	0,607	0,6545	0,61	0,6889	0,67
Carvão	0,1289	0,113	0,1554	0,189	0,0845	0,285
Gás não condensável	0,1553	0,28	0,1901	0,201	0,2266	0,045

Em Papadikis et al. (2009) realizou-se um estudo em CFD da reação de uma partícula de biomassa dentro de um reator de pirólise rápida. As seguintes condições foram tomadas para a simulação:

- A partícula entra no reator à velocidade nula.
- É considerada a transferência de calor radial, sendo a partícula esférica. Os materiais considerados para a condução de calor foram o carvão e a biomassa, ou seja, é considerado que na partícula não há gases ou líquidos internamente.
- O volume da partícula não se altera, a variação de densidade se dá simplesmente pela diferença de densidade entre o carvão e a biomassa.

Portanto para o cálculo foi considerado a equação de conservação de massa por componente, onde a massa inicial de biomassa se converte em gás, líquido e carvão através de uma cinética química de primeira ordem que segue a lei de Arrhenius. Ainda nessa cinética química é considerada também a transformação do líquido em carvão e

gás. Tendo como valor inicial a densidade da biomassa e o volume de biomassa, as cinéticas químicas, é possível calcular a conversão de cada componente, como visto na Figura 2.10.

Para a conservação de quantidade de movimento, foi considerada a equação geral para cada componente. Também foram levadas em conta as forças de interação entre as fases, que foram determinadas a partir de equações constitutivas. Para a transferência de calor foi considerada a transferência convectiva do gás inerte para a partícula e condutiva no interior da partícula.

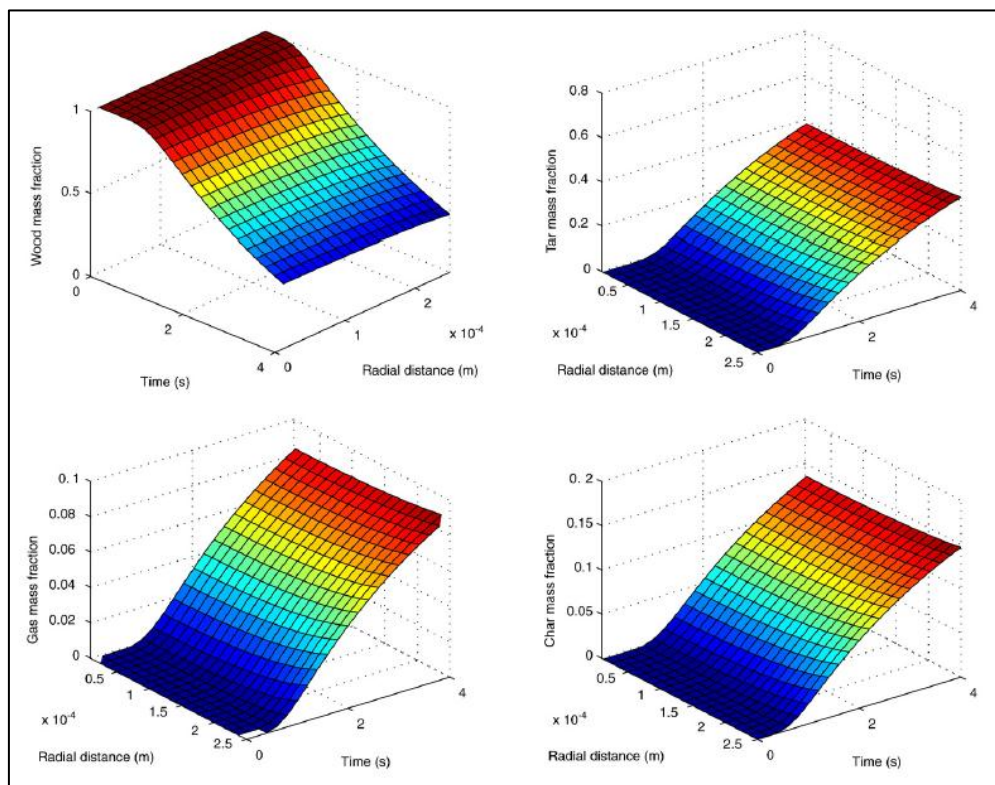


Figura 2.9: Fração mássica de produto em função do tempo e da posição radial. Extraído de Papadikis et al. (2009)

É possível observar que boa parte da biomassa original não reagiu até a partícula deixar o reator (no tempo de quatro segundos). O valor obtido para a conversão em bio-óleo foi muito baixo comparado aos valores para reatores de pirólise rápida, que geralmente atingem valores mínimos de 60%. Isto pode ser explicado pelo fato que a geometria de uma partícula só possui valores menores de taxa de transferência de calor, quando comparada a geometria de leito fluidizado.

2.4 Distribuidores para leitos fluidizados

Segundo Yang (1999) as funções do distribuidor de gás em um reator de leito fluidizado são: induzir uma fluidização estável e uniforme por todo o leito, operar durante longos períodos sem entupir ou quebrar-se, evitar a passagem de sólidos para o resto dos equipamentos, minimizar a atrição do material do leito e suportar o peso do leito durante as partidas e durante o tempo parado do reator.

Independente de sua forma física, eles podem ser classificados pelo direcionamento dado ao gás de entrada no reator, que pode ser tanto ascendente, descendente ou com entrada lateral. A escolha entre qual distribuidor é mais adequado leva em conta fatores como as condições do processo, a viabilidade mecânica e o custo do distribuidor. No passado, o desenho de um distribuidor era muito mais um processo manual do que um processo documentado, entretanto estudos como os de Kunii e Levenspiel (1977) mostram passos que podem ser tomados na hora de se projetar o distribuidor mais adequado.

2.4.1 Tipos de distribuidores

O primeiro tipo de distribuidor a ser discutido é o de placa perfurada, Figura 2.11. Suas principais vantagens são de simples fabricação, baixo custo, ser de simples fabricação, fácil de ser alterado e de simples limpeza, porém apresenta desvantagens como permitir a passagem de sólidos para o resto do reator, alta perda de carga e estar sujeito a deformações devido à expansão térmica.

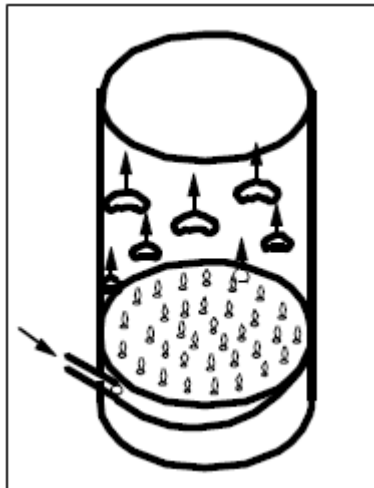


Figura 2.10: Distribuidor do tipo placa perfurada. Yang (1999)

Outro tipo de distribuidor que tem grande importância são os de *bubblecap* (Figura 2.12). As principais vantagens são evitar a passagem de sólidos para o resto do reator, considerável intervalo de funcionamento e baixa perda de carga. Suas desvantagens são o custo, possibilidade de regiões estagnadas, difícil de realizar modificações e limpeza difícil.

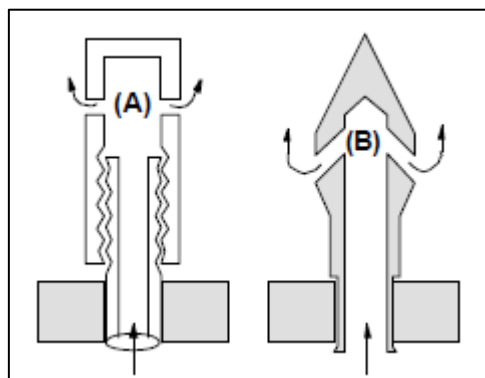


Figura 2.11: Distribuidor do tipo *bubble cap*. Yang (1999)

3 Materiais e Métodos

No presente trabalho, o principal software utilizado foi o COMSOL (www.comsol.com). Neste capítulo será apresentado brevemente o COMSOL e o equacionamento seguido para os cálculos.

3.1 O COMSOL

O COMSOL é uma ferramenta de fluidodinâmica computacional, onde o usuário pode montar seu estudo através de modelos pré-definidos disponíveis no software, através de uma interface amigável com o usuário. Além dos modelos presentes no COMSOL, o usuário pode inserir modelos customizados para o processo a ser simulado.

Para resolver o problema estudado no COMSOL, primeiramente é necessário introduzir a geometria a ser estudada. Isso é possível de ser realizado no próprio COMSOL, pois nele é possível unir formas básicas como cilindros, esferas e cones através de composições e assim formar a geometria desejada. O próximo passo é introduzir o modelo que se deseja estudar, caso o equacionamento do COMSOL já satisfaça as necessidades do usuário, caso contrário é possível realizar alterações no equacionamento do problema.

A seguir é necessário determinar quais materiais vão preencher cada componente da geometria, determinado os componentes, é necessário introduzir os valores das propriedades físicas dos materiais, como densidade e viscosidade. O passo seguinte é determinar condições de contorno e as fronteiras onde elas estão sendo aplicadas. Os exemplos de condição de contorno são: velocidade de entrada prescrita, pressão de saída prescrita e velocidade nula nas paredes. É possível também alterar a malha utilizada para discretização do domínio. Após computar os dados, o COMSOL apresenta a evolução do erro entre os passos até atingir a tolerância determinada pelo o usuário. Terminados os cálculos, os resultados podem ser demonstrados através de perfis que mostram a magnitude da variável ou podem ser estabelecidos pontos de tomada dos valores exatos, que são demonstrados em uma tabela.

3.2 Modelo matemático utilizado no distribuidor de leito poroso

No presente trabalho primeiramente foi realizado um estudo de distribuidor de leito poroso para um reator de leito fluidizado. O tipo de distribuidor escolhido foi um meio poroso composto por vidro sinterizado, devido às suas vantagens de distribuição de ar e por ser o tipo de distribuidor utilizado no reator presente no laboratório do GIMSCOP/DEQUI (Grupo de Intensificação, Modelagem, Simulação, Controle e Otimização de Processos), que serviu como exemplo para o estudo.

A seguir, serão apresentadas as equações consideradas no estudo do distribuidor de leito poroso. Para a tubulação e o reator, partiu-se das equações generalizadas da continuidade e do balanço de quantidade de movimento.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (3.1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla)u \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + F \quad (3.2)$$

Sendo as variáveis da equação ρ a densidade do fluido em kg/m^3 , u o vetor da velocidade do fluido em m/s , p a pressão em Pa, τ o tensor das tensões viscosas em Pa e F outras forças presentes no escoamento em $\text{kg/m}^2 \cdot \text{s}^2$.

A equação da continuidade (equação 3.1) nada mais representa do que a conservação de massa. O primeiro termo corresponde à variação da densidade com o tempo, que é considerada nula no problema, pois o estudo foi tomado no estado estacionário. A densidade também foi tomada como constante em função do espaço. Esta medida foi tomada devido ao baixo número de Mach do escoamento (muito menor que 0,3).

Já a equação 3.2 representa a conservação de quantidade de movimento. O termo à esquerda do sinal de igualdade representa as forças advectivas do escoamento. Nesse caso, a derivada da velocidade em relação ao tempo é considerada igual à zero, pois o estudo é realizado no estado estacionário. O primeiro termo à direita do sinal de igualdade representa as forças de pressão no escoamento. O termo seguinte corresponde às forças viscosas. O último termo fica reservado para outras forças que influenciem o escoamento, como forças gravitacionais, magnéticas, etc.

Tomando as considerações dos parágrafos anteriores e mais a consideração de escoamento isotérmico, forças gravitacionais e fluido newtoniano, têm-se as seguintes equações:

$$\nabla \cdot u = 0 \quad (3.3)$$

$$\rho(u \cdot \nabla)u = -\nabla p + \mu \nabla^2 u + \rho g \quad (3.4)$$

onde a viscosidade é representada por μ em Pa.s e g é o vetor da aceleração da gravidade em m/s^2 .

Para o escoamento no meio poroso (distribuidor), as equações de Brinkman foram utilizadas. As equações de Brinkman correspondem às equações de conservação de massa e da conservação de quantidade de movimento para o leito poroso. As equações são dadas por:

$$\rho \nabla \cdot u = Q_{br} \quad (3.5)$$

$$\frac{\rho}{\varepsilon_p} \left(u \cdot \nabla \frac{u}{\varepsilon_p} \right) = -\nabla p + \frac{\mu}{\varepsilon_p} \nabla^2 u - \frac{2\mu}{3\varepsilon_p} (\nabla \cdot u)I - \left(\frac{\mu}{k_{br}} + \beta_f |u| + Q_{br} \right) u + \rho g \quad (3.6)$$

O termo Q_{br} , que é considerado como a troca de massa entre o fluido e o leito poroso, tendo a unidade de $\text{kg}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$. O termo ε_p corresponde à porosidade do meio, que é um fator adimensional. O termo I corresponde a matriz identidade. A constante k_{br} corresponde à permeabilidade do meio, sendo a unidade m^2 . O termo β_f corresponde ao coeficiente de Forchheimer (kg/m^4).

3.3 Modelo matemático utilizado no distribuidor de pratos perfurados

Foi estudado também no COMSOL o procedimento proposto por Yang (1999) para a montagem de um distribuidor para reatores de leito fluidizado a partir do critério da perda de carga. O primeiro passo é determinar a perda de carga no reator e analisar a seguinte condição:

$$\Delta P_{grid} \geq 0,3\Delta P_{bed} \quad (3.7)$$

onde o termo ΔP_{grid} é a perda de carga no distribuidor em Pa e o termo ΔP_{bed} é a perda de carga no leito fluidizado em Pa. O próximo passo é considerar a seguinte equação, que representa a velocidade através do orifício em função da perda de carga, da densidade do gás e de um coeficiente de descarga.

$$U_h = C_d \sqrt{\frac{2\Delta P_{grid}}{\rho_g}} \quad (3.8)$$

onde U_h é a velocidade do gás através do orifício em m/s. C_d é um coeficiente que tem um valor de 0,8 geralmente segundo Yang (1999) e ρ_g representa a densidade do gás que escoar através do prato em kg/m³. Em seguida tem-se a seguinte equação para o cálculo do número de aberturas:

$$Q = N \frac{\pi d^2}{4} U_h \quad (3.9)$$

onde Q é a vazão em m³/s, N é o número de aberturas, d é o diâmetro em m e U_h é a velocidade na abertura em m/s. Determinando o tamanho do diâmetro da abertura, é possível determinar o número de aberturas recomendado para certo distribuidor.

Para se determinar o passo a ser tomado em relação às perfurações foi considerada a seguinte equação:

$$L_H = \frac{1}{\sqrt{N_d}} \quad (3.10)$$

Onde L_h é a distância de centro a centro das perfurações e N_d é o número de perfurações por metro quadrado.

Já para a simulação do escoamento do fluido, foi considerado o modelo de turbulência do tipo RANS (*Reynolds averaged Navier-Stokes*) e o modelo utilizado foi o modelo κ - ϵ (Mohammadi e Pironneau 1997). Este tipo de modelo é apenas uma alteração da equação de Navier-Stokes, que inclui alguns termos para contabilizar as flutuações na velocidade causada pela turbulência. O valor das constantes utilizadas no modelo κ - ϵ nas simulações foram os valores pré-determinados pelo COMSOL.

4 Formulação do Problema ou Estudo de Caso

4.1 Estudo do reator de pirólise experimental

O objetivo desta simulação é obter o perfil de velocidades e os valores de queda de pressão no reator de pirólise rápida presente no GIMSCOP. Este reator possui a geometria demonstrada na figura 4.1 e o seu distribuidor é vidro sinterizado comercial do tipo G1, que possui grãos aproximadamente esféricos com diâmetro de 90 – 150 μm .

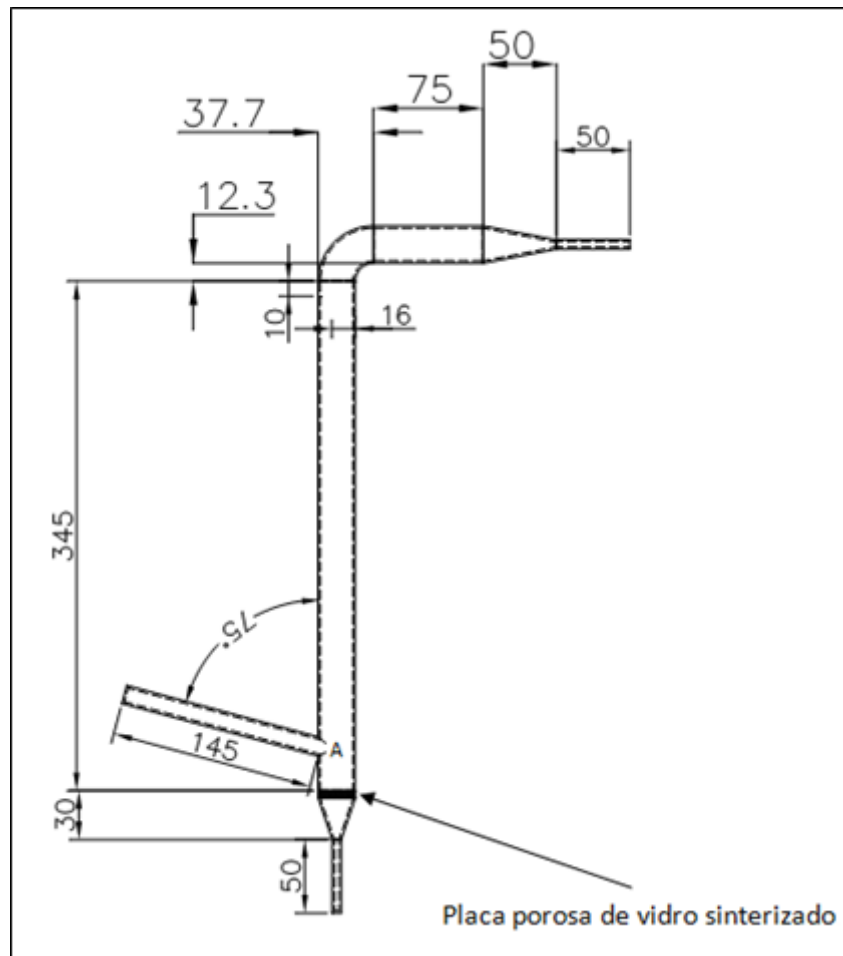


Figura 4.1: Reator de pirólise rápida presente no GIMSCOP (dimensões em mm).

A entrada de ar ocorre no tubo vertical inferior de 0,050 m. A saída do ar passa pelo tubo superior horizontal de 0,050 m. A entrada de biomassa ocorre no ponto A. A placa de vidro sinterizada tem 0,004 m de espessura. Todas as dimensões na figura 4.1 estão em milímetros.

Para realizar a validação do modelo construído no COMSOL, foram realizadas tomadas de queda de pressão no reator com distribuidor de vidro sinterizado. Os pontos de tomada de queda de pressão foram os pontos de entrada e saída do reator. Para este procedimento, foi ligado ao reator um manômetro em “U” tendo água como fluido manométrico. O tubo de entrada da biomassa foi bloqueado a fim de evitar a saída de ar por ele, sendo desconsiderado também na simulação, devido à ausência de escoamento naquela região e sua mínima influência nos resultados. No experimento o reator se encontrava vazio, apenas possuindo no seu interior a placa de vidro sinterizado.

Para se determinar a perda de carga no reator, foi variada a vazão de entrada de ar nele. A vazão inicial foi de 2 L/min e ela foi variada até 7 L/min. A tabela 4.1 demonstra os valores de coluna de água obtidos no manômetro em U para as diferentes vazões utilizadas no reator.

A seguinte equação foi considerada:

$$\rho_{\text{água}}gh = \Delta P \quad (4.1)$$

Onde ρ corresponde à densidade da água a 20°C (999,2 kg/m³ (NIST)) e g é a aceleração da gravidade (9,81 kg/m².s) e h é a altura de água em m.

Tabela 4.1: Valores de perda de carga em função da vazão.

Vazões (L/min)	Altura de água (mH2O)	Perda de carga total experimental (Pa)
2	0,036	352,52
2,5	0,052	509,20
3	0,066	646,29
4	0,098	959,65
5	0,136	1331,76
6	0,174	1703,87
7	0,222	2173,90

A geometria do reator utilizado na modelagem e simulação é apresentada na Figura 4.2. A malha utilizada é representada na Figura 4.3.

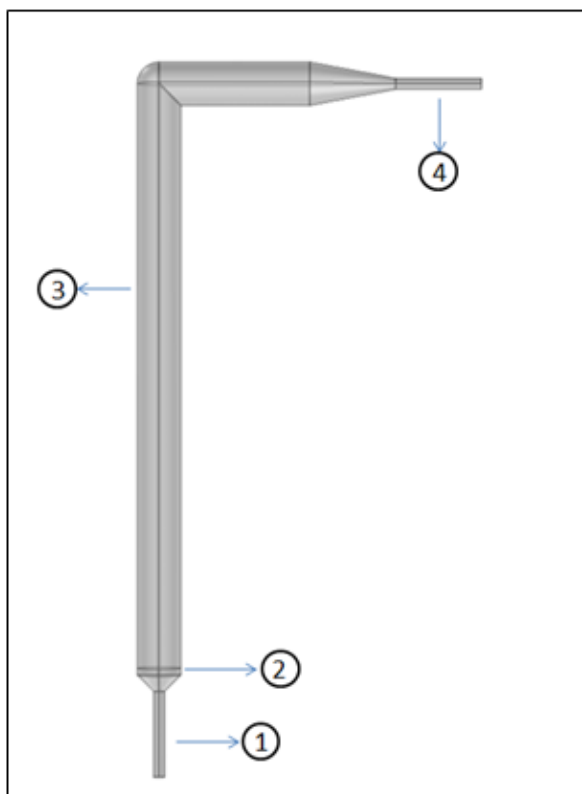


Figura 4.2: Reator de pirólise rápida com distribuidor do tipo placa porosa montado no COMSOL.

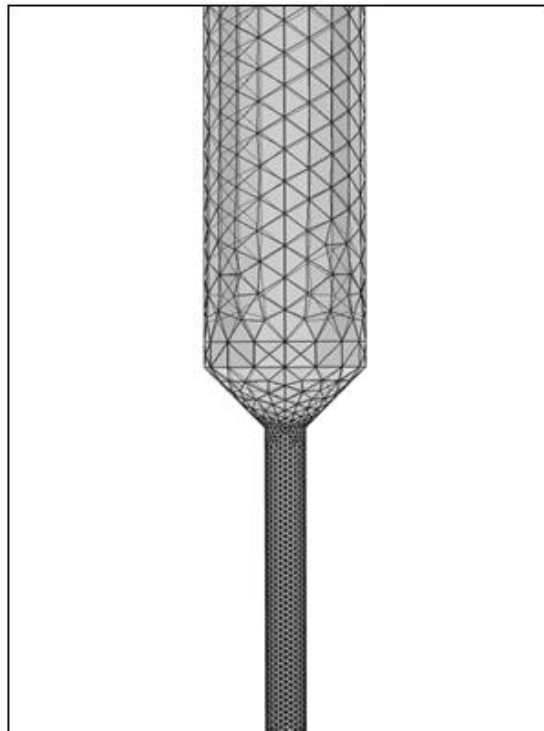


Figura 4.3: Malha demonstrando a discretização realizada no comprimento de entrada do reator.

Onde o tubo de entrada é representado pelo número 1 possui comprimento de 0,050 m e diâmetro de 0,0127 m. O reator é representado pelo número 3 e tem comprimento de 0,345 metros e diâmetro de 0,0254 m. O reator possui um joelho no seu final a fim de evitar a passagem de sólidos para a corrente de saída. O tubo de saída é representado pelo número 4 e possui comprimento de 0,050m e diâmetro de 0,0127 m

O reator da simulação possui as dimensões idênticas ao do reator experimental. Os parâmetros de entrada no COMSOL foram:

- Viscosidade do ar a 20°C, $\mu_{ar} = 1,85 \times 10^{-5}$ (NIST), densidade do ar a 20°C, $\rho_{ar} = 1,184 \text{ kg/m}^3$ (NIST).
- Condições de contorno: velocidade na entrada na região 1 da figura 4.2 fixada e pressão de saída igual à atmosférica.
- Na região indicada pelo número 2 na figura 4.2, foi selecionada a opção leito poroso no COMSOL. Os valores de entrada necessários foram k_{br} e β_f , que serão discutidos nos resultados.
- Foram postos pontos de medida de pressão no COMSOL nas regiões 1 e 4 a fim de validar os resultados de perda de carga com os valores experimentais.
- A simulação se encerrou quando o valor de erro relativo obtido alcançasse o valor de 0,001.

Os valores de velocidade utilizados estão apresentados na tabela 4.2:

Tabela 4.2: Valores das velocidades de entrada no reator.

Vazões (L/min)	Velocidade superficial (m/s)
2	1,05
2,5	1,32
3	1,58
4	2,11
5	2,63
6	3,16
7	3,69

A partir destes valores, as simulações foram realizadas no COMSOL e os resultados obtidos são discutidos no próximo capítulo.

4.2 Estudo dos distribuidores de pratos perfurados

No caso dos distribuidores de pratos perfurados, o objetivo da simulação foi demonstrar como o diâmetro das perfurações e a vazão de entrada podem afetar a qualidade do leito fluidizado. Isto vai ser observado através das diferentes penetrações dos jatos de ar, que são formados após a passagem deste pelo prato.

Conforme as equações apresentadas na seção 3.1.2, é preciso determinar dois parâmetros, que são a queda de pressão através do leito e a velocidade superficial na entrada do distribuidor. Para montar a simulação foram extraídos dados de (Sau et al. 2007). Os dados retirados foram diâmetro das partículas no reator, velocidade superficial de entrada no prato e queda de pressão no leito fluidizado. A geometria do reator montado na simulação foi arbitrária, mas possui valores próximos de dimensão quando comparado ao reator da referência (Sau et al. 2007). Os valores obtidos de (sau et al. 2007) são: $d_p = 717 \times 10^{-6}$ m (diâmetro das partículas de areia), $u_f = 0,26$ m/s (velocidade superficial de fluidização) e $\Delta P_{bed} = 1506$ Pa (perda de carga no leito fluidizado).

A geometria do reator montado no COMSOL pode ser vista na figura 4.4:

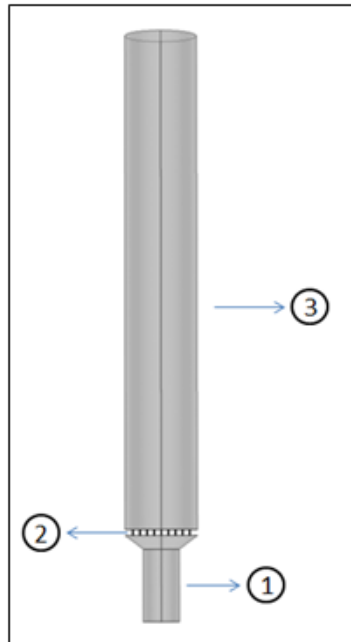


Figura 4.4: Reator de pirólise rápida com distribuidor do tipo prato perfurado montado no COMSOL.

Onde o número 1 representa o tubo de entrada com comprimento de 0,05 m e diâmetro de 0,025 m. O número 2 representa o distribuidor de pratos perfurados. O diâmetro das perfurações utilizadas foi um valor arbitrário de 6×10^{-4} m. O único critério utilizado para este valor foi o diâmetro da perfuração ser menor que o diâmetro das partículas, o que evitaria a queda da areia através do distribuidor. Aqui no modelo apenas se visualiza as perfurações, pois é através delas que o fluido escoar. O número 3 representa o reator que tem diâmetro de 0,05 m e comprimento de 0,345 m.

A geometria dos pratos montados para a simulação está representada na Figura 4.5 e 4.6. As Figuras 4.7 e 4.8 mostram a estrutura de malha formada no COMSOL.

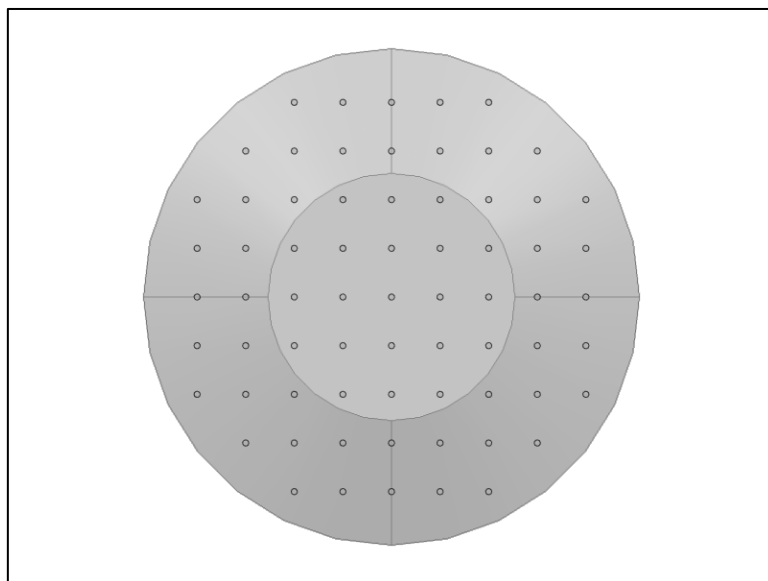


Figura 4.5: Vista superior da geometria de prato de 84 orifícios utilizado nas simulações.

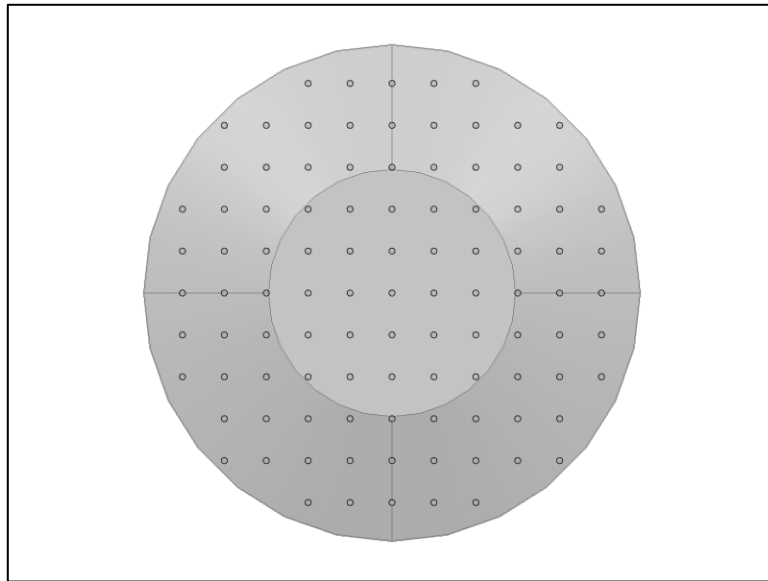


Figura 4.6: Vista superior da geometria de prato de 120 orifícios utilizado nas simulações.

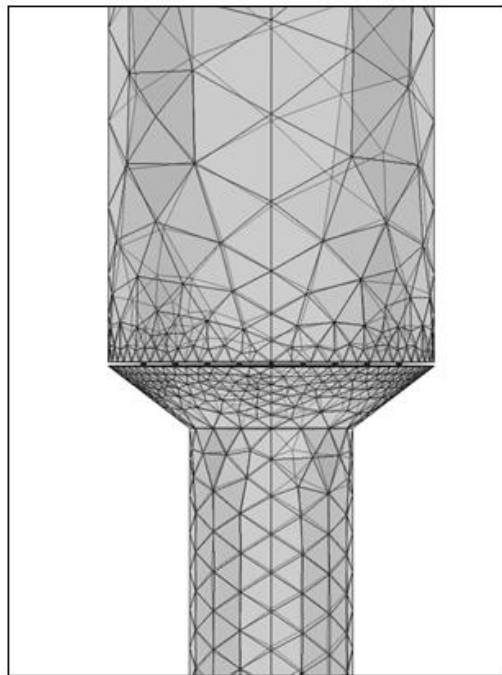


Figura 4.7: Detalhe da malha utilizada na discretização do domínio.

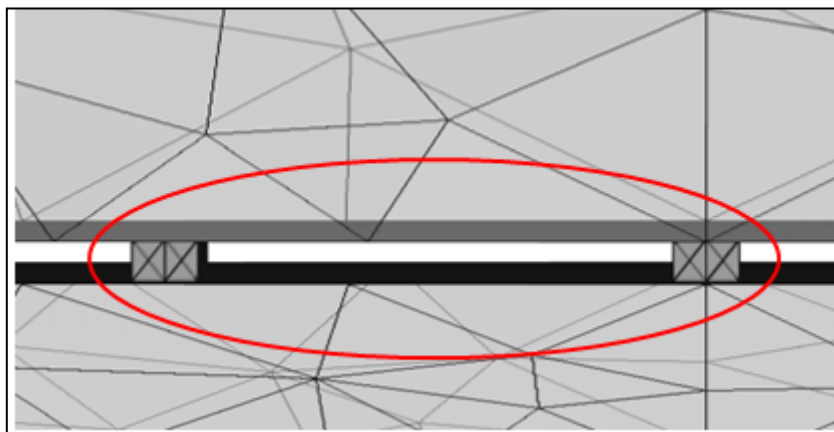


Figura 4.8: Detalhe da malha no orifício do prato perfurado.

A fim de comparar diferentes condições nos pratos foram realizadas três simulações. Na primeira utilizaram-se as equações presentes na seção 3.3 e a partir dos valores $\Delta P_{\text{bed}} = 1506 \text{ Pa}$, $\Delta P_{\text{grid}} = 451 \text{ Pa}$, $u_f = 0,26 \text{ m/s}$ (que corresponde a uma vazão de 30,6 L/min através do tubo de número 1 na Figura 4.3), $d = 6 \times 10^{-4}$ e $C_d = 0,8$, obtendo-se o valor de 84 perfurações no prato, representado na Figura 4.4. Na segunda simulação foi alterada a vazão de entrada para um valor 20% maior ou vazão de 36,7 L/min. A geometria do prato não foi alterada. Na terceira simulação foi alterada a geometria do prato, aumentando-se o número de perfurações para 120 perfurações, conforme a Figura 4.5.

Os parâmetros de entrada no COMSOL foram:

- Viscosidade do ar a 20°C, $\mu_{\text{ar}} = 1,85 \times 10^{-5}$ (NIST), densidade do ar a 20°C, $\rho = 1,184 \text{ kg/m}^3$ (NIST).
- Foi selecionado o modelo pré-montado pelo COMSOL de escoamento turbulento para toda a geometria do reator.
- Foram posicionados pontos de medida de pressão antes e depois do prato a fim de determinar a perda de carga no distribuidor.
- Condições de contorno: velocidade de entrada na região 1 da figura 4.3 de 1,04 m/s no primeiro caso e 1,248 m/s no segundo caso. A outra condição foi pressão de saída igual à atmosférica.
- A simulação se encerrou quando o valor de erro relativo obtido alcançasse o valor de 0,001.

A partir destas simulações foram obtidos os resultados discutidos no próximo capítulo.

5 Resultados

5.1 Simulação do distribuidor de leito poroso

Foram estabelecidos através de iterações manuais os parâmetros do leito poroso que não eram conhecidos. Por não influenciar na simulação devido aos valores das outras constantes, a porosidade foi mantida no valor de 0,25, que se encontra dentro do valor proposto por (Yasuda e Melo 2005) que fica entre 0,15 e 0,41. Para a permeabilidade e o coeficiente de Forchheimer foram obtidos os valores de $1,2 \times 10^{-11} \text{ m}^2$ e $1,8 \times 10^7 \text{ kg/m}^4$ respectivamente.

Como estimativa inicial destes parâmetros para as iterações no COMSOL, foi feito o seguinte cálculo: os valores experimentais de perda de carga no reator em função da velocidade foram plotados no gráfico presente na Figura 5.1 e foi feita uma regressão quadrática para se determinar os coeficientes da equação de Forchheimer:

$$\nabla p = \frac{\mu}{k_{br}} u + \rho \beta_f u^2 \quad (5.1)$$

Onde μ é a viscosidade do ar, que tem o valor de $1,85 \times 10^{-5} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ (NIST). κ é a permeabilidade do meio, que se deseja calcular. ρ é a densidade do ar, que tem o valor de $1,184 \text{ kg/m}^3$ (NIST). A velocidade é representada por u e tem os valores dados pela Tabela 5.1. A partir destes dados, sabendo a espessura da placa, que é 0,004 m, e sabendo a equação da regressão quadrática é possível calcular seus parâmetros.

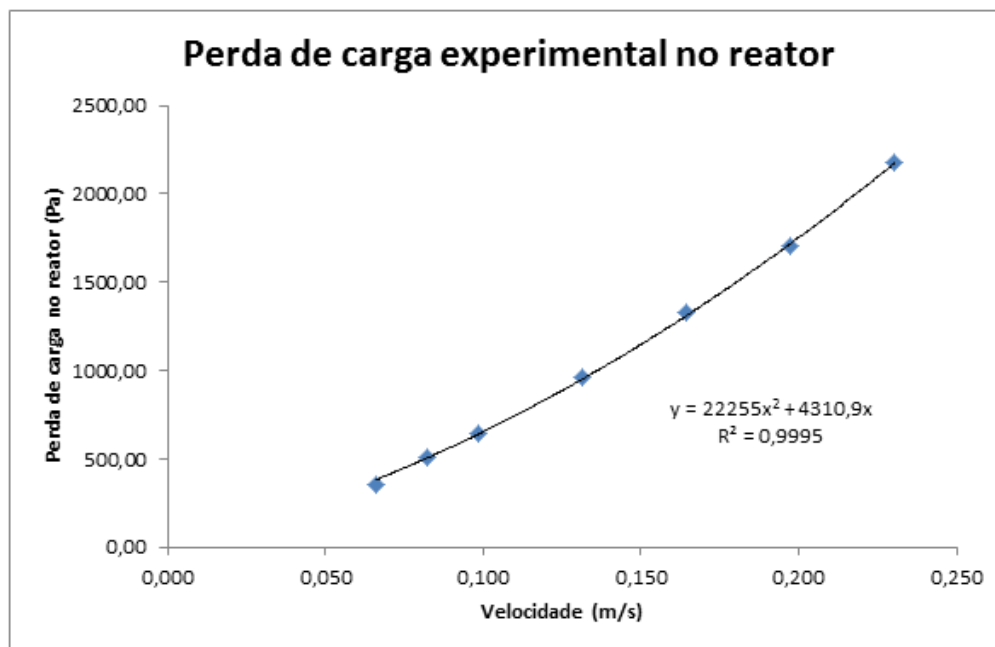


Figura 5.1: Perda de carga experimental no reator em função da velocidade de entrada no reator.

De posse dos coeficientes da regressão quadrática demonstrada na Figura 5.1 foi obtido o valor de $1,75 \times 10^{-11} \text{ m}^2$ para κ e um valor de $4,65 \times 10^6$ para β . Entretanto esses valores não são corretos, pois os valores de velocidade superficial nos cálculos são considerados uniformes, o que não é verdade, pois há uma expansão na área de escoamento na entrada do reator, gerando um jato no centro do meio poroso. É possível

observar isto na Figura 5.2, que representa o comprimento de entrada do reator e a região representada pelo número 1 é o distribuidor. Também é possível visualizar na Figura 5.2 a distribuição da velocidade no resto do reator em função da posição. Com a finalidade de obter uma simulação que obtivesse perdas de carga aproximadas, foram iterados os valores de κ e β . As iterações foram realizadas manualmente. As iterações κ e β cessaram quando o maior erro relativo obtido entre o valor experimental e calculado de perda de carga fosse, em módulo, menor que 10%.

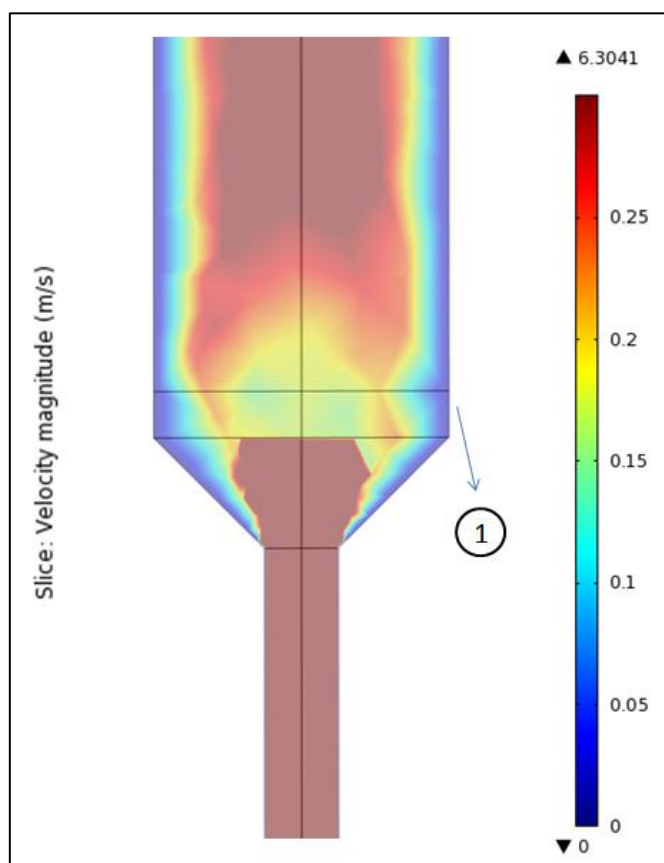


Figura 5.2: Magnitude da velocidade em função da posição no reator. Vazão de 7 L/min.

Para comparar a qualidade da simulação no COMSOL, foi realizada uma comparação entre a perda de carga obtida no COMSOL e a experimental. A Tabela 5.1 mostra os resultados:

Tabela 5.1: Validação dos resultados obtidos no COMSOL.

Vazões (L/min)	Perda de carga total experimental (Pa)	Perda de carga total calculada(Pa)	erro (%)
2	352,52	378,90	7,48
2,5	509,20	501,01	-1,61
3	646,29	633,15	-2,03
4	959,65	925,75	-3,53
5	1331,76	1253,93	-5,84
6	1703,87	1615,66	-5,18
7	2173,90	2009,43	-7,57

É possível observar na Figura 5.2 que o distribuidor de leito poroso de vidro sinterizado possibilita a formação de um bom leito fluidizado, pois a o perfil de velocidades observado após o distribuidor é bem uniforme, o que proporciona boa mistura no reator e tempos de residência similares para todas as partículas de biomassa presentes no leito. Quanto aos erros de queda de pressão é possível perceber que os valores de erro não passam de 7,73%, o que não é um erro grande nesse caso, o que leva à conclusão de que o leito poroso calculado está representando de forma confiável o perfil de velocidade no reator experimental. O prosseguimento das iterações para os parâmetros κ e β poderia gerar resultados ainda melhores.

5.2 Simulação do distribuidor de pratos perfurados

Primeiramente foi simulado no COMSOL o caso considerando os valores apresentados na seção 4.2. O seguinte resultado foi obtido para o perfil de velocidades:

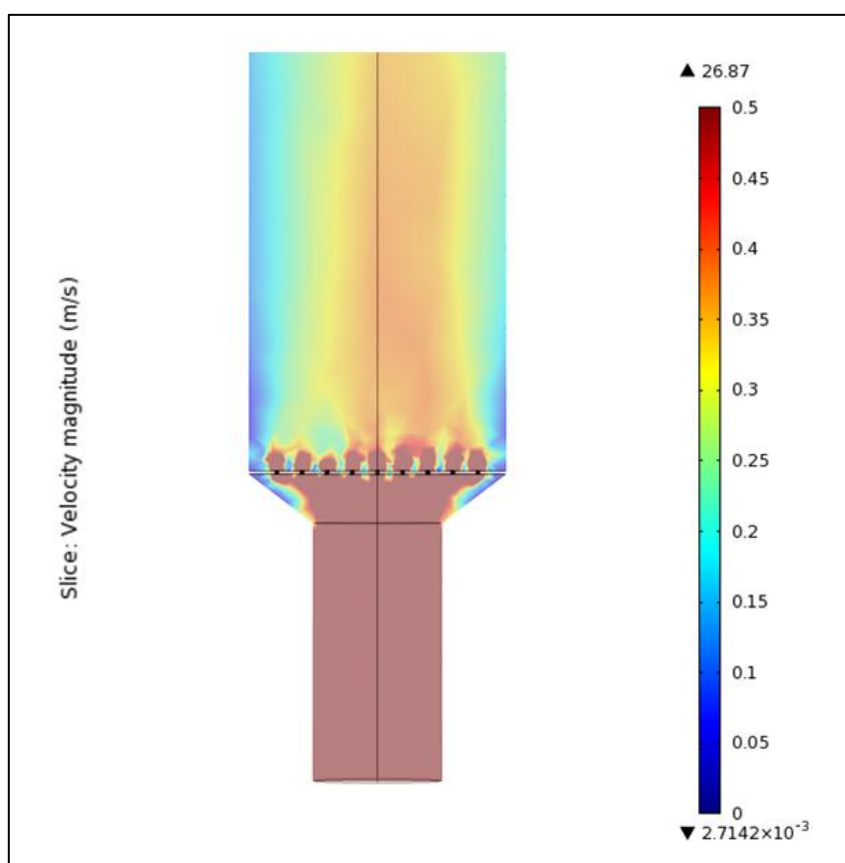


Figura 5.3: Magnitude da velocidade em função da posição do reator para o distribuidor de 84 orifícios.

Segundo Yang (1999) o jato de entrada é um parâmetro muito importante, pois ele determina se haverá ou não uma boa mistura das partículas no leito e o grau de atrito que será realizado pelas partículas no reator, por exemplo. Para comparar com o resultado da Figura 5.3 foi realizada uma simulação, na qual a vazão de entrada é 20% maior que o caso na Figura 5.3. Esta simulação está representada na Figura 5.4

Outra simulação foi realizada aumentando-se o número de perfurações no prato, representada na Figura 5.5.

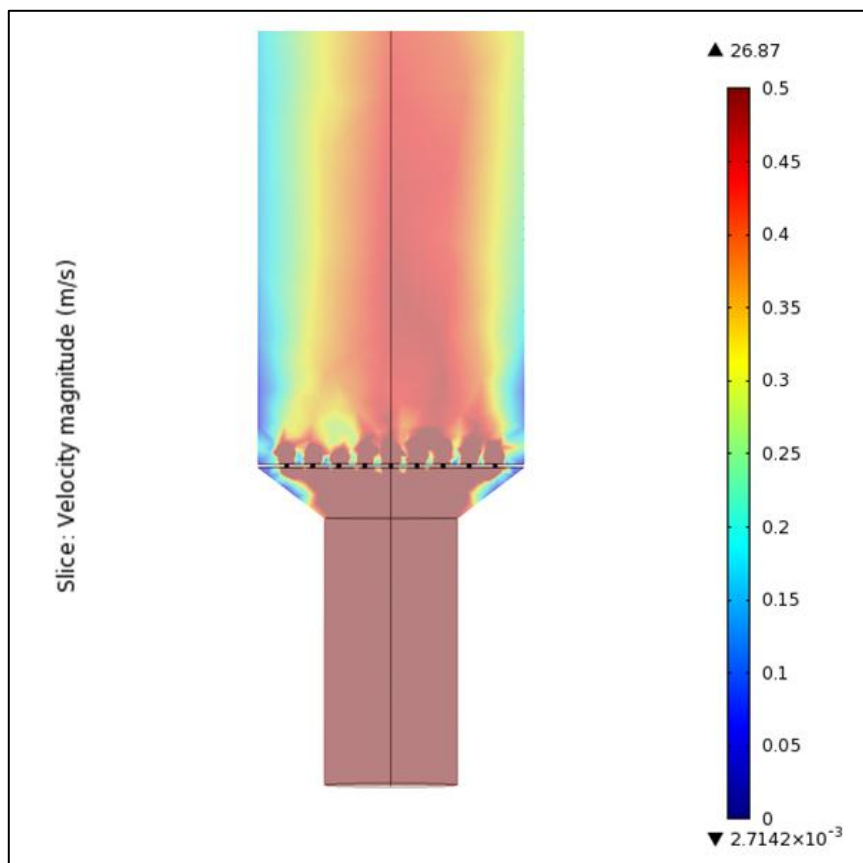


Figura 5.4: Magnitude da velocidade em função da posição no reator quando aumentada em 20% a vazão.

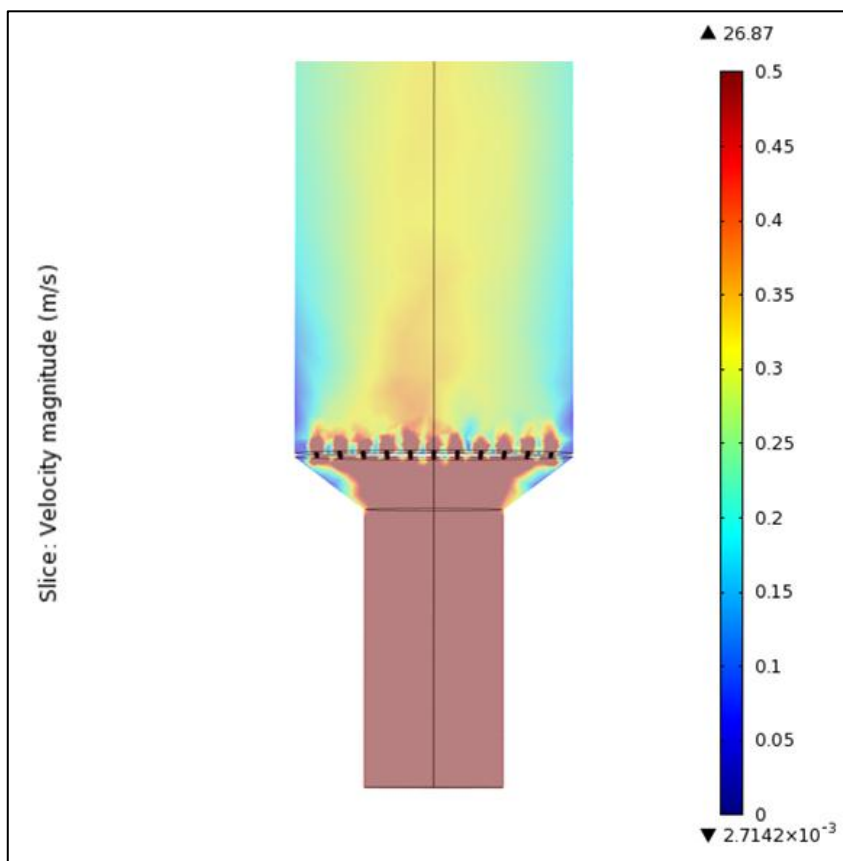


Figura 5.5: Magnitude da velocidade em função da posição no reator para o distribuidor de 120 orifícios.

Na Figura 5.3 é possível observar que o gás, após a passagem pelos pratos, forma jatos que chegam um muito próximo do outro, o que pode ocasionar a formação de um grande jato devido à união destes, gerando problemas de distribuição de temperaturas e problemas de diferentes tempos de residência das partículas, resultando num reator de pirólise rápida de difícil controle da composição dos produtos oriundos dele.

Quanto a Figura 5.4 é visto que as condições de jato se deterioram ainda mais, pois é possível perceber uma união de dois jatos, formando um único jato muito maior que os outros presentes, podendo ocasionar os problemas já comentados.

A Figura 5.5 demonstra jatos mais bem distribuídos, quando comparado aos outros casos. Isto resulta em jatos homogêneos, o que acarreta melhores taxas de transferência de calor, resultando em gradiente de temperatura mínimo, e tempos de residência homogêneos para as partículas no interior do reator.

É possível observar estes resultados também através de uma análise qualitativa dos valores de perda de carga para cada prato. Os valores de perda de carga obtidos para as Figuras 5.3, 5.4 e 5.5 foram, respectivamente, 441 Pa, 625 Pa e 233 Pa.

Na Figura 5.3 temos uma perda de carga de 0,3 em relação à perda de carga observada no hipotético leito, apresentado na seção 3.2. Observa-se que provavelmente o valor de 0,3 é um valor inadequado, pois a figura não apresentou bom padrão de jatos. Esse valor é considerado alto por alguns autores como em Patel, Waje et al. (2008). A Figura 5.4 por possuir uma vazão maior, possui perdas de carga maiores, resultando em qualidade de jato pior ainda. Já a Figura 5.5, por possuir mais perfurações que o primeiro caso, apresenta menor perda de carga e melhores jatos, levando a concluir que provavelmente a razão de 0,3 entre ΔP_{grid} e ΔP_{bed} é um valor alto demais para as equações propostas na seção 3.2.

Ainda é possível comparar estes distribuidores de pratos perfurados com o distribuidor de leito poroso. Apesar de o distribuidor de leito poroso apresentar uma melhor distribuição de velocidades, ele possui alta perda de carga, quando comparado com os pratos perfurados, o que pode torná-lo muito caro ou inviável para aplicações industriais, apesar de gerar um leito fluidizado de boa qualidade.

6 Conclusões e Trabalhos Futuros

O processo de produção de energia através da biomassa deve se intensificar no futuro devido à escassez de petróleo inevitável. Neste cenário de necessidade de desenvolvimento de tecnologias relacionadas à produção de energia utilizando biomassa, a pirólise rápida tem um papel de grande importância, pois é capaz de produzir um líquido combustível, que pode substituir os combustíveis fósseis em diversas aplicações, através de matéria orgânica de baixo valor agregado.

Existem diversas geometrias de reatores possíveis para a realização da reação de pirólise rápida, porém a geometria que tem mais se destacado é a de leito fluidizado, devido às ótimas taxas de transferência de calor, fácil controle de temperatura e baixo custo. Porém estas características são garantidas através da utilização de um distribuidor apropriado, que produza principalmente uma boa distribuição de velocidade na entrada do reator sem inserir grandes valores de perda de carga no sistema.

Por causa da grande complexidade dos processos envolvidos na reação de pirólise rápida em um reator de leito fluidizado, as ferramentas computacionais tem um papel fundamental no estudo e otimização de reatores de pirólise rápida.

No presente trabalho foram realizados estudos no COMSOL, a fim de mostrar as possibilidades oferecidas pela fluidodinâmica computacional para a simulação de diferentes distribuidores para reatores de leitos fluidizados utilizados para o processo de pirólise rápida. Foram realizadas simulações com dois tipos de distribuidores: placa de vidro sinterizado e placa com perfurações.

Os resultados obtidos demonstram que o COMSOL é uma ferramenta computacional promissora para a simulação do escoamento através de distribuidores de reatores de leito fluidizado, pois os erros obtidos foram baixos. Foi possível observar também comparar o desempenho de diferentes geometrias de distribuidores, verificando se eles são adequados ou não para uma dada aplicação.

Quanto ao COMSOL, é possível concluir que é um *software* de interface amigável com o usuário iniciante, permitindo a este a montagem rápida de problemas simples através de estudos pré-modelados no COMSOL. Entretanto ele possui muitas interfaces ocultas, o que torna seu uso não muito dinâmico para usuários mais avançados que querem introduzir seus próprios modelos no COMSOL.

Visando estudos futuros, as seguintes sugestões podem ser dadas:

- Utilizar modelos de leito fluidizado e de cinéticas químicas junto com estudos de distribuidores a fim de obter uma simulação significativa de um reator de pirólise rápida.
- Acoplar a interface MATLAB com o COMSOL, que é possível, a fim de evitar iterações manuais como as ocorridas neste estudo.

7 Referências

- Boateng, A. A. and P. L. Mtui (2012). "CFD modeling of space-time evolution of fast pyrolysis products in a bench-scale fluidized-bed reactor." Applied Thermal Engineering **33-34**(0): 190-198.
- Bridgwater, A. V. (2011). "Review of fast pyrolysis of biomass and product upgrading." Biomass and Bioenergy(2011).
- Bridgwater, A. V. and G. V. C. Peacocke (2000). "Fast pyrolysis processes for biomass." Renewable and Sustainable Energy Reviews **4**(1): 1-73.
- Choi, H. S., Y. S. Choi, et al. (2011). "Fast pyrolysis characteristics of lignocellulosic biomass with varying reaction conditions." Renewable Energy(2011).
- Kunii, D. and O. Levenspiel (1977). Fluidization engineering. Huntington, N.Y., R. E. Krieger Pub. Co.
- Mohammadi, B. and O. Pironneau (1997). "Unsteady separated turbulent flows computation with wall-laws and $\kappa - \epsilon$ model." Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering **148**(3-4): 393-405.
- Mohan, D., C. U. Pittman, et al. (2006). "Pyrolysis of Wood/Biomass for Bio-oil: A Critical Review." Energy & Fuels **20**(3): 848-889.
- Papadakis, K., S. Gu, et al. (2009). "Application of CFD to model fast pyrolysis of biomass." Fuel Processing Technology **90**(4): 504-512.
- Patel, A. K., S. S. Waje, et al. (2008). "Tomographic diagnosis of gas maldistribution in gas–solid fluidized beds." Powder Technology **185**(3): 239-250.
- Salvi, D., D. Boldor, et al. (2011). "COMSOL Multiphysics model for continuous flow microwave heating of liquids." Journal of Food Engineering **104**(3): 422-429.
- Sau, D. C., S. Mohanty, et al. (2007). "Minimum fluidization velocities and maximum bed pressure drops for gas–solid tapered fluidized beds." Chemical Engineering Journal **132**(1-3): 151-157.
- Saxena, R. C., D. K. Adhikari, et al. (2009). "Biomass-based energy fuel through biochemical routes: A review." Renewable and Sustainable Energy Reviews **13**(1): 167-178.
- Serdar, Y. (2004). "Pyrolysis of biomass to produce fuels and chemical feedstocks." Energy Conversion and Management **45**(5): 651-671.
- Yang, W.-c. (1999). Fluidization, solids handling and processing : industrial applications. Westwood, N.J., Noyes Publications.
- Yasuda, M. T. and W. L. B. Melo (2005). "A new method to determine open porosity and permeability constants of open-pore sintered glasses by photoacoustic technique." Cerâmica **51**: 259-264.
- NIST. The NIST Chemistry webbook. Disponível online em: <http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?Formula=H2O&Nolon=on&Units=SI&cTC=on>. Acessado em: 25/11/2011.