



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO MARANHÃO
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLÓGICAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AEROESPACIAL**



FERNANDA HELLEN DE SOUZA SANTOS

**SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE GASEIFICAÇÃO VIA CFD
VISANDO A PRODUÇÃO DE BIOQUEROSENE PARA O
SETOR AEROESPACIAL**

São Luís/MA
2023

FERNANDA HELLEN DE SOUZA SANTOS

**SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE GASEIFICAÇÃO VIA CFD
VISANDO A PRODUÇÃO DE BIOQUEROSENE PARA O
SETOR AEROESPACIAL**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Aeroespacial do Centro de Ciências Exatas e Tecnologia da Universidade Federal do Maranhão, requisito para obtenção do título de Mestre em Engenharia Aeroespacial.

Orientador: Prof. Dr. Alex Oliveira Barradas Filho;
Coorientador: Prof^ª. Dr^ª. Mikele Cândida Sousa de Sant'Anna

São Luís/MA
2023

Santos, Fernanda Hellen de Souza.

Simulação do processo de gaseificação via cfd visando a produção de bioquerosene para o setor aeroespacial /
Fernanda Hellen de Souza Santos. - 2023.

96 f.

Coorientador(a): Mikele Cândida Sousa de SantAnna.

Orientador(a): Alex Oliveira Barradas Filho.

Dissertação (Mestrado) - Programa de Pós-graduação em Engenharia Aeroespacial, Universidade Federal do Maranhão, São Luís, 2023.

1. Abordagem Euleriana. 2. Biomassa. 3. CFD. 4. Gaseificação. 5. Leito Fluidizado. I. Barradas Filho, Alex Oliveira. II. de SantAnna, Mikele Cândida Sousa. III. Título.

FERNANDA HELLEN DE SOUZA SANTOS

**SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE GASEIFICAÇÃO VIA CFD
VISANDO A PRODUÇÃO DE BIOQUEROSENE PARA O
SETOR AEROESPACIAL**

Trabalho apresentado à banca de dissertação

Dissertação de Mestrado aprovada. São Luís - MA, 16 de outubro de 2023:

Prof. Dr. Alex Oliveira Barradas Filho - PPGAERO/UFMA
Orientador

Prof. Dr^a. Mikele Cândida Sousa de Sant'Anna - PPGAERO/UFMA
Coorientadora

Prof. Dr. Marcio Aurelio Pinheiro Almeida - PPGAERO/UFMA

Prof. Dr. Ricardo de Andrade Medronho – DEQ/UFRJ

Dedico este trabalho a minha mãe, família e todos que dedicam suas vidas para avanço acadêmico-científico do país.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus, Pai todo poderoso, que pela intercessão de minha mãe, Maria Santíssima me sustenta todos os dias e fortalece para continuar firme nesse caminho.

A minha mãe Simone, que está comigo me incentivando, cobrando, aconselhando e sempre apoiou meu sonho de seguir a carreira acadêmica, mesmo quando as coisas estão difíceis.

A minha família, em especial as minhas tias Telma, Arlete, minha madrinha Terezinha, meus tios Nildo, Carlos, pelo apoio e amor comigo ao longo da minha vida.

Ao meu namorado Jairo Caldas, pelo carinho, cuidado e momentos de descontração.

Ao meu amigo Dianderson Ferreira, no qual compartilho conquistas e desafios da vida desde a graduação.

Aos meus orientadores Prof. Dr. Alex Barradas e Prof. Dr^a. Mikele Sant'Anna, pela amizade e confiança durante o mestrado. Agradeço por todas nossas conversas, pela paciência, conselhos, puxões de orelha e todos os esforços, principalmente computacionais para desenvolvimento desse trabalho. Vocês são inspiração para continuar na jornada acadêmica.

Ao Lab CFD, da Escola de Química – UFRJ, onde foi possível a realização das simulações para os resultados desta dissertação. Meu agradecimento especial ao Prof. Dr. Ricardo Medronho e aos alunos Sarah e Pablo.

Agradeço a todos que contribuíram de alguma forma na construção desse trabalho.

O presente projeto foi desenvolvido com apoio da CAPES, através da concessão de bolsa de estudo de Mestrado.

“É justo que muito custe o que muito vale”

Santa Teresa d'Ávila

SANTOS, Fernanda Hellen de Souza. **Simulação do processo de gaseificação via cfd visando a produção de bioquerosene para o setor aeroespacial**. 2023. 96 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Aeroespacial). Programa de Pós-graduação em Engenharia Aeroespacial do Centro de Ciências Exatas e Tecnologia da Universidade Federal do Maranhão, São Luís, 2023.

RESUMO

A utilização de biomassa como fonte de biocombustível tem crescido nas últimas décadas como uma alternativa sustentável aos produtos derivados do petróleo, incluindo o querosene de aviação (QAv). O biocombustível oferece uma opção para reduzir as emissões de gases de efeito estufa, responsáveis pelas mudanças climáticas. Neste estudo, investigou-se o processo de conversão de biomassa via gaseificação em um reator de leito fluidizado. Utilizou-se o ANSYS FLUENT 2022 R2 para simular um gaseificador, considerando a presença de uma fase gasosa e uma fase particulada (composta por biomassa e areia), utilizando a abordagem Euleriana e a Teoria Cinética Granular. O modelo computacional foi construído, utilizando a cinética descrita no trabalho de Nunn et al. (1985) através da criação de uma UDF que foi compilada no ANSYS FLUENT. A malha 2 foi selecionada após a realização de um teste de malha. Foram analisados a influência de diferentes temperaturas (800, 973 e 1200 K) no processo de gaseificação, e nas concentrações composicionais dos gases de síntese (CO, CO₂, H₂, and CH₄). Na simulação do modelo matemático para o processo de pirólise de biomassa, os resultados mostraram a composição final da produção dos gases, do alcatrão (0,493%) e do carvão (0,090%). À temperatura utilizada na simulação, 973 K, ocorre o craqueamento térmico dos gases leves do alcatrão, garantindo melhor desempenho do processo de gaseificação.

Palavras-chave: Abordagem Euleriana; Biomassa; CFD; Gaseificação; Leito Fluidizado.

SANTOS, Fernanda Hellen de Souza. **Simulation of the gasification process via cfd aiming at biokerosene production for the aerospace sector**. 2023. 96 p. Dissertation (Master's in Aerospace Engineering). Graduate Program in Aerospace Engineering, Center for Exact and Technological Sciences, Federal University of Maranhão, São Luís, 2023.

ABSTRACT

The use of biomass as a biofuel source has grown in recent decades as a sustainable alternative to petroleum-derived products, including aviation kerosene (AVK). Biofuels offer an option to mitigate greenhouse gas emissions, responsible for climate changes. In this study, the process of biomass conversion through gasification in a fluidized bed reactor was investigated. ANSYS FLUENT 2022 R2 was employed to simulate a gasifier, considering the presence of a gas phase and a particulate phase (composed of biomass and sand), using the Eulerian approach and Granular Kinetic Theory. The computational model was constructed by utilizing the kinetics described in Nunn et al.'s work (1985) through the creation of a User-Defined Function (UDF) compiled in ANSYS FLUENT. The mesh test was conducted based on the works of Taghipour et al. (2005) and Sant'Anna et al. (2017). The results of the mesh test indicated that Mesh 2 was selected due to its superior quality parameters. Within the chemical kinetics, the influence of temperatures (800, 973, and 1200 K) on the compositional concentrations of synthesis gases (CO, CO₂, H₂, and CH₄) was analyzed. In the simulation of the mathematical model for the biomass pyrolysis process, the results showcased the final composition of gas production, tar (0,493%), and char (0,090%). At the simulation temperature of 973 K, thermal cracking of the light tar gases occurs, ensuring better performance of the gasification process.

Keywords: Biomass; CFD; Eulerian Approach Fluidized Bed Gasification.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Produção de biocombustíveis por país/região e tipo de combustível, 2016-2022.....	21
Figura 2.2 – Participação de Renováveis na matriz energética.....	31
Figura 2.3 – Avaliação de produção agrícola no Brasil e sua geração de resíduos.....	32
Figura 2.4 – Superfícies de resposta para temperatura e velocidade de rotação.....	33
Figura 2.5 – Esquema etapas do processo de gaseificação de biomassa.....	35
Figura 2.6 – Regimes de fluidização em função da velocidade superficial do gás.....	38
Figura 2.7 – Diagrama da classificação de Geldart (fluido: ar; T: 25°C; p: 1 atm).....	45
Figura 2.8 – Função do método numérico.....	50
Figura 2.9 – Geometria discretizada malha da tubeira 2D.....	55
Figura 3.1 – Esquema da simulação do processo de gaseificação.....	60
Figura 4.1 – Perfis longitudinais de queda de pressão para as malhas: a) Malha 1; Malha 2 e Malha 3.....	63
Figura 4.2 – Pressão versus altura do leito para diferentes malhas ($v_g= 0,38 \text{ m.s}^{-1}$, $t=20 \text{ s}$).....	65
Figura 4.3 – Fração volumétrica na fase 2 para as temperaturas: a) 800 K; b) 973 K e c) 1200 K.....	68
Figura 4.4 – Fração molar do CO na fase 1 para as temperaturas: a) 800 K; b) 973 K e c) 1200 K.....	70
Figura 4.5 – Fração molar do CO ₂ na fase 1 para as temperaturas: a) 800 K; b) 973 K e c)1200 K.....	72
Figura 4.6 – Fração molar do O ₂ na fase 1 para as temperaturas: a) 800 K, b) 973 K e c) 1200 K.....	74
Figura 4.7 – Fração molar do H ₂ na fase 1 para as temperaturas: a) 800 K, b) 973 K e c) 1200 K.....	76
Figura 4.8 – Fração molar do CH ₄ na fase 1 para as temperaturas: a) 800 K, b) 973 K e c) 1200 K.....	78
Figura 4.9 – Distribuição da fração molar do fenol (C ₆ H ₆ O) para a temperatura de 973 K (0; 0,5; 1; 5; 10; 15; 20 s)	80

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Diferentes técnicas de conversão de biomassa.....	34
Tabela 2.2 – Reações de oxidação.....	37
Tabela 2.3 – Descrição fluidodinâmica da bolha.....	41
Tabela 2.4 –Parâmetros hidrodinâmicos.....	41
Tabela 2.5 –Parâmetros hidrodinâmicos para o <i>slugging</i> no leito.....	43
Tabela 2.6 - Principais reações químicas no processo de gaseificação.....	52
Tabela 2.7 – Cinéticas usadas no modelo do processo de gaseificação.....	53
Tabela 2.8 – Revisão da modelagem CFD para gaseificação.....	56
Tabela 3.1 – Estatística das malhas da geometria.....	57
Tabela 3.2 – Propriedades das fases.....	58
Tabela 3.3 – Modelos utilizados para o cálculo das viscosidades.....	59
Tabela 3.4 – Resumo dos métodos de solução.....	59
Tabela 3.5 – Parâmetros da simulação.....	60
Tabela 3.6 – Parâmetros da cinética de primeira ordem para pirólise primária (NUNN et al., 1985).....	62
Tabela 3.7 – Parâmetros da cinética de primeira ordem para pirólise primária de (RADANESH et al., 2006).....	62
Tabela 4.1 – Parâmetros que avaliam a qualidade da Malhas.....	65
Tabela 4.2 – Resultados da pirólise primária.....	79

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ANAC	Agência Nacional de Aviação Civil
ANP	Agência Nacional do Petróleo, Biocombustíveis e Gás Natural
ASTM	American Society for Testing and Materials
BTL	Biomass to Liquid
CFD	Computational Fluid Dynamics
COP26	26ª Conferência das Nações Unidas sobre o Clima
CORSIA	Carbon Offsetting and Reduction Scheme for International Aviation
DEM	Discrete Element Method
DPM	Discrete Particle Model
EEE	Espaço Econômico Europeu
EDP	Equações Diferenciais Parciais
ETS	Emissions Trading System
FCC	Fluid Catalytic Cracking
GEE	Gases de Efeito Estufa
GFA	Gaseificador de Fluxo Arrastado
GLF	Gaseificador de Leito Fluidizado
GNS	Gás Natural Sintético
ICAO	International Civil Aviation Organization
IATA	International Air Transport Association
IEA	International Energy Agency
IPCC	Intergovernmental Panel on Climate Change
KTGF	Kinetic Theory of Granular Flows
LFB	Leito Fluidizado Borbulhante
LFC	Leito Fluidizado Circulante
MDF	Métodos de Diferenças Finitas
MEF	Métodos de Elementos Finitos
MVF	Métodos de Volumes Finitos
NDC	Nationally Determined Contribution
OCDE	Organização para a Cooperação e Desenvolvimento Econômico
ONU	Organização das Nações Unidas
QAV	Querosene de Aviação
RenovaBio	Política Nacional de Biocombustíveis
SAF	Sustainable Aviation Fuel
SND	Simulação Numérica Direta
SPK	Synthetic Paraffinic Kerosene

LISTA DE SÍMBOLOS

Latinas

C_d	Coeficiente de arraste	[Adimensional]
D_p	Diâmetro da partícula	[μm]
D_r	Diâmetro do reator	[m]
G	Constante gravitacional	[$\text{m}\cdot\text{s}^{-2}$]
H	Altura do leito	[m]
H_{bc}	Coeficiente de troca térmica bolha-nuvem	[$\text{kJ}/\text{m}^3\cdot\text{s}\cdot\text{K}$]
H_{ce}	Coeficiente de troca térmica nuvem-emulsão	[$\text{kJ}/\text{m}^3\cdot\text{s}\cdot\text{K}$]
H_{be}	Coeficiente de troca térmica bolha-emulsão	[$\text{kJ}/\text{m}^3\cdot\text{s}\cdot\text{K}$]
$K_{i,Bc}$	Coeficiente de transferência de massa (gás) bolha-nuvem para o componente i	[s^{-1}]
$K_{i,Ce}$	Coeficiente de transferência de massa (gás) nuvem-emulsão para componente i	[s^{-1}]
$K_{i,Be}$	Coeficiente de transferência de massa (gás) bolha-nuvem para o componente i	[s^{-1}]
$K_{i,We}$	Coeficiente de transferência de massa (sólido) rasto-emulsão	[s^{-1}]
\bar{I}	Tensor tensão	[Adimensional]
K_{gs}	Coeficiente de interação entre as fases	[Adimensional]
P	Pressão	[m]
U_{mf}	Velocidade mínima de fluidização	[$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]
U_{mb}	Velocidade mínima de borbulhamento	[$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]
U_{ms}	Velocidade mínima de <i>slugging</i>	[$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]
U_b	Velocidade da bolha	[$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]
U_e	Velocidade da emulsão	[$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]
T_0	Temperatura de início do processo	[K]
T	Tempo	[s]
U_0	Velocidade do gás na entrada do reator	[$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]
U_g	Velocidade superficial do gás	[$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]
V_i, U	Velocidade	[$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]
U_t	Velocidade terminal das partículas	[$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]
Z	Altura do reator	[m]

Gregas

ρ	Massa Específica	[kg.m ⁻³]
α	Fração Volumétrica	[Adimensional]
ε	Porosidade	[Adimensional]
ε_b	Porosidade Na Bolha	[Adimensional]
$\bar{\tau}$	Tensor Tensão Da Fase Particulada	[Pa]
μ	Viscosidade	[kg.s ⁻¹ m ⁻¹]
μ_s	Viscosidade Cisalhante	[kg.s ⁻¹ m ⁻¹]
λ_s	Viscosidade Global	[kg.s ⁻¹ m ⁻¹]
δ	Temperatura Granular Da Fase Solida	[Adimensional]

Subscritos

A	Areia
b	Bolha
B	Biomassa
bio	Bio-Óleo (Alcatrão)
g	Gás
i	Componente
s	Sólidos
t	Terminal
T	Tensor tensão

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	17
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	19
2.1	COMBUSTÍVEL SUSTENTÁVEL PARA AVIAÇÃO (<i>SUSTAINABLE AVIATION FUEL - SAF</i>) NO BRASIL E NO MUNDO.....	19
2.1.1	Emissões GEE e Biocombustíveis	20
2.1.2	Biocombustíveis Alternativos e Combustíveis Sintéticos.....	21
2.2	MOTIVAÇÕES E ACORDOS.....	23
2.3	ROTAS TECNOLÓGICAS CERTIFICADAS.....	24
2.3.1	SPK-HEFA: querosene parafínico sintetizado via hidrocessamento de ésteres/ácidos graxos.....	25
2.3.2	SPK-ATJ: querosene parafínico sintetizado via álcoois por “ <i>Alcohol to Jet</i> ”	26
2.3.3	SPK-FT: querosene parafínico sintetizado via hidrocessamento por Fischer- Tropsch.....	27
2.3.4	SPK-SIP: querosene isoparafínico sintetizado via fermentação de açúcares.....	28
2.4	BIOQUEROSENE.....	
2.5	MATÉRIAS-PRIMAS POTENCIAIS.....	29
2.6	GASEIFICAÇÃO.....	34
2.6.1	Reações químicas do processo de gaseificação.....	35
2.6.1.1	Secagem.....	35
2.6.1.2	Pirólise.....	36
2.6.1.3	Oxidação.....	36
2.7	GASEIFICAÇÃO EM LEITO FLUIDIZADO.....	37
2.7.1	Modelos e Divisões Hidrodinâmicas para Reatores de Leito Fluidizado.....	39
2.7.2	Leito Fluidizado Borbulhante.....	40
2.7.3	Leito Fluidizado Borbulhante com <i>Slug</i>	42
2.7.4	Leito Fluidizado Circulante.....	44
2.7.5	Classificação das Partículas.....	45
2.8	MODELAGEM MULTIFÁSICA.....	46
2.8.1	Abordagem Euler-Euler.....	47
2.8.2	Equações de Conservação.....	48

2.8.2.1	Conservação de Massa.....	48
2.8.2.2	Conservação de Momento.....	48
2.8.2.3	Tensor Tensão.....	48
2.8.3	Modelo Turbulência κ - ϵ	49
2.9	MÉTODOS NUMÉRICOS	50
2.10	CINÉTICA QUÍMICA.....	51
2.10.1	Reações Químicas.....	52
2.10.2	Reações Químicas Homogêneas e Heterogêneas.....	52
2.11	FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD).....	54
3	METODOLOGIA.....	57
3.1	SOFTWARE E HARDWARE.....	57
3.2	GEOMETRIA.....	57
3.3	TESTE DE MALHA.....	57
3.4	ANÁLISE HIDRODINÂMICA.....	58
3.5	CINÉTICA DO PROCESSO DE GASEIFICAÇÃO.....	60
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	63
4.1	ANÁLISE E SIMULAÇÃO HIDRODINÂMICA.....	63
4.2	ESCOLHA DA MALHA.....	65
4.2.1	Análise Hidrodinâmica para Malha 2	66
4.2.2	Análise da Composição do Gás através das Temperaturas.....	69
4.3	PIRÓLISE PRIMARIA.....	79
5	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS.....	81
5.1	Perspectiva para Trabalhos Futuros.....	82
	REFERÊNCIAS.....	83

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

A indústria da aviação é dependente do uso de combustível fóssil, o *jetfuel* (combustível de aviação), que contribuiu para as emissões de gases causadores do efeito estufa (GOTA *et al.* 2019; KUSHWAH *et al.*, 2022). Para enfrentar esse grande desafio, fontes de energia limpa são urgentemente necessárias, fortalecendo a transição para uma economia de baixo carbono e com maior sustentabilidade. Espera-se que a biomassa assuma a liderança entre outras formas de energia renovável, devido à sua disponibilidade e facilidade de processamento.

A utilização de bioquerosene no setor aeroespacial tem despertado grande interesse como uma alternativa sustentável aos combustíveis fósseis convencionais (LIU *et al.*, 2022). O bioquerosene é produzido a partir de fontes renováveis, como biomassa, culturas agrícolas e resíduos orgânicos (NEULING *et al.*, 2015; KOISTINEN *et al.*, 2019), e pode desempenhar um papel crucial na redução das emissões de gases de efeito estufa associadas à aviação.

No campo da pesquisa, estão sendo conduzidas investigações abrangentes em diversas fontes de biomassa para a produção de bioquerosene (LLAMAS *et al.*, 2012; XAVIER *et al.*, 2014; AL-ZAINI *et al.*, 2023; MIKHAIL *et al.*, 2023). Esses esforços de pesquisa têm como foco o desenvolvimento de tecnologias de conversão mais eficientes e economicamente viáveis (DOS SANTOS *et al.*, 2018), bem como a aplicação do biocombustível de forma a garantir sua compatibilidade com as aeronaves existentes. É crucial que o bioquerosene atenda a rigorosas especificações técnicas, incluindo propriedades de combustão, viscosidade e ponto de fulgor, a fim de assegurar o desempenho seguro das aeronaves.

A conversão da biomassa pode ser utilizada para produzir diversos tipos de combustíveis na forma sólida, líquida e gasosa, além da própria biomassa atuar como combustível por meio da combustão direta (SALEM *et al.*, 2018). Com a assinatura do acordo na COP26, o Brasil se comprometeu a substituir, na sua matriz energética, entre 45% e 50% por energias renováveis, a sua matriz energética, até 2030 (EPE, 2022). O país possui grande potencial para produção descentralizada de energia, o que possibilita a redução do custo com o transporte, armazenamento e processamento (ENNES, 2021).

A gaseificação de biomassa produz gases combustíveis como monóxido de carbono, hidrogênio e metano a partir de materiais orgânicos ou fósseis contendo carbono (ISMAIL *et al.*, 2016; MONTEIRO *et al.*, 2017; MAYA *et al.*, 2021). Podem ser utilizados como agente de gaseificação o ar, oxigênio, vapor ou uma mistura deles. Os gases produzidos são conhecidos como gás de síntese, sendo considerado um produto primário, podendo posteriormente ser

convertido em produtos secundários como querosene, gasolina, diesel etc. (LOHA *et al.*, 2014; KOU *et al.*, 2022; PANDEY *et al.*, 2022).

Nestes termos, o processo de gaseificação utilizando a biomassa na indústria, é uma das tecnologias mais versáteis para o processamento de combustíveis de biomassa em setores de consumo, como aquecimento, geração de energia (ZADRAVEC *et al.*, 2022) e células de combustível de hidrogênio (SIDEK *et al.*, 2022).

Nas últimas décadas, além de estudos experimentais, as simulações numéricas de gaseificadores têm sido empregadas para entender o processo de gaseificação e melhorar sua eficiência. As simulações numéricas via CFD (*Computational Fluid Dynamics*) podem otimizar e aumento de escalas dos sistemas de gaseificação, reduzindo o custo com experimentos e o tempo. No entanto, para representar com precisão as complexas reações químicas envolvidas na gaseificação, muitas vezes é necessária a aplicação de modelos cinéticos personalizados (XUE *et al.*, 2011; SANT'ANNA *et al.*, 2017; ERI *et al.*, 2018; MONTEIRO *et al.*, 2017; MAYA *et al.*, 2021).

Nesse contexto, a UDF (*User-Defined Function*) do ANSYS FLUENT desempenha um papel fundamental, permitindo implementação de modelos cinéticos personalizados para diferentes reações químicas, garantindo resultados mais precisos em estudos complexos de gaseificação. Existem poucos trabalhos na literatura que fazem a implementação das cinéticas, pois requer conhecimentos avançados em programação, especialmente em linguagens como C, para implementar corretamente as equações cinéticas, e em mecânica dos fluidos (ZHANG & XIAO, 2015; GAO *et al.*, 2016).

Os estudos com a modelagem CFD permitem a análise do gás obtido através da conversão da biomassa, a previsão da cinética da reação, transferência de calor-massa e o comportamento hidrodinâmico. Os modelos matemáticos, também possibilitam analisar as reações que ocorrem no interior do gaseificador, tais como: a formação de cinzas e alcatrão entre outros fatores importantes (BUENTELLO *et al.*, 2019). Por meio da variação das condições iniciais, é possível analisar as melhores condições para a síntese, além da redução nos custos experimentais e no tempo da pesquisa, o que contribui na otimização do processo (SPEIGHT, 2020; KUMAR *et al.*, 2009; MONDAL *et al.*, 2011; AHMAD *et al.*, 2016; OKOLIE *et al.*, 2021).

O objetivo geral deste trabalho, foi simular um gaseificador de leito fluidizado borbulhante utilizando a cinética de gaseificação descrita por Nunn (1985) implementada via UDF, utilizando o ANSYS FLUENT 22.0 para a simulação do reator com as dimensões reais, em um sistema composto por gás, areia e biomassa, empregando a abordagem Euleriana através da Teoria Cinética de Escoamentos Granulares (*Kinetic Theory of Granular Flow - KTGF*).

CAPÍTULO II

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 COMBUSTÍVEL SUSTENTÁVEL PARA AVIAÇÃO (*SUSTAINABLE AVIATION FUEL - SAF*) NO BRASIL E NO MUNDO

A aviação comercial é um setor importante da economia. O mercado de transporte aéreo é responsável pela movimentação de passageiros, produtos e cargas, por diversas empresas em diferentes pontos do planeta, reduzindo as distâncias e aumentando a conectividade entre as regiões.

O cenário da pandemia afetou fortemente o serviço aéreo, o setor perdeu valores em torno de US\$126,4 bilhões, obtendo um rendimento de apenas 61% do rendimento do ano anterior (IATA, 2021a). Apesar disso, em 2020, a Associação Internacional de Transportes Aéreos (*International Air Transport Association – IATA*) destacou que o transporte aéreo foi essencial no comércio entre fronteiras, arrecadando US \$384 bilhões no mercado internacional.

No setor da aviação nacional, apresentou redução de 59,9 mil voos internacionais em 2020 (redução de 58,9 %), enquanto o número de passageiros transportados sofreu queda de 72%, com 6,8 milhões de partidas saindo do Brasil anualmente, com destino a 58 aeroportos em 35 países (ANAC, 2021a). Internamente, foram realizados 405 mil voos (redução de 49,5%) e transportados 45,2 milhões de passageiros (redução de 52,5%), através das conexões entre os 108 aeroportos. Em termos econômicos, em 2020, essa atividade contribuiu com R\$ 10 bilhões no PIB brasileiro (ANAC, 2021a).

No Brasil, atualmente, o transporte aéreo está em constante crescimento, acima da média global. Por exemplo, no primeiro trimestre de 2022, o setor de aviação brasileiro transportou mais de 22,5 milhões de passageiros, cerca de 56,6% a mais que em relação ao mesmo período do ano anterior (ANAC, 2022) e 325 mil toneladas de carga aérea para dentro do Brasil (ANAC, 2021b).

A indústria da aviação, assim como as companhias aéreas detém de altos gastos principalmente com combustível. Esse insumo, expressou cerca de 19% dos custos operacionais das empresas aéreas no ano de 2021. Este valor indicou queda em comparação com 23% no período pré-pandemia, segundo dados fornecidos pela Associação Internacional de Transporte Aéreo (IATA, 2021b). No cenário nacional, os custos e despesas operacionais dos serviços aéreos, atingiram U\$40,8 bilhões, no ano de 2019. Segundo a Agência Nacional de Aviação Civil (ANAC, 2019), os custos com combustíveis e lubrificantes representaram 29,6% comprometendo consideravelmente os ganhos financeiros.

A demanda energética da indústria aeronáutica está quase totalmente focada em *jetfuel* (gasolina de aviação), a base de petróleo, possuindo propriedades que podem ser usadas em turbinas a gás de forma eficiente e com segurança. O mercado global de combustível de aviação comercial é de 106 bilhões de galões e deve crescer para mais de 230 bilhões de galões até 2050 (EIA, 2020a). No Brasil, a demanda por combustível de aviação em 2020, foi de aproximadamente 3,5 milhões de m³ (com redução brusca de 49,2% em relação a 2019), dos quais refinarias brasileiras produziram 75% e o restante foi importado de vários países (ANP, 2021).

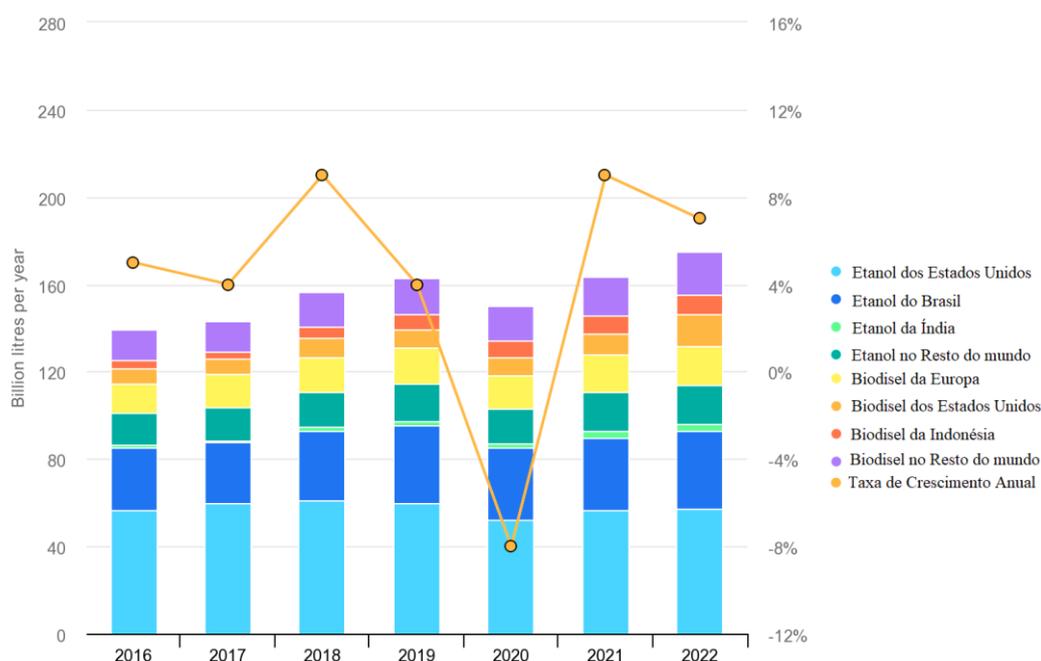
2.1.1 Emissões dos Gases do Efeito Estufa (GEE) e Biocombustíveis

A aviação é conhecida como o setor com maior dificuldade para descarbonizar, por apresentar alta dependência de combustíveis líquidos de origem fóssil (GOTA *et al.*, 2019). O objeto principal da descarbonização dos gases do efeito estufa (GEE) é a diminuição das emissões de CO₂, que são provenientes da combustão de querosene de aviação (QAV) de combustível fóssil, apesar das suas emissões não-CO₂ também poderem afetar o clima. Segundo Fleming e Lépinay (2019), as emissões de CO de voos internacionais correspondem cerca de 65% do total de emissões da aviação, cerca de aproximadamente 1000 Mt.CO₂ em 2018. Neste segmento do setor de transporte, as emissões de CO₂ apresentaram um aumento contínuo de aproximadamente 2,5% ao ano. Já o setor como um todo apresentou, para o período de 2010 a 2018, um aumento de 4% ao ano.

Progressões realizadas pela *International Energy Agency* (IEA) serão necessárias uma gama de soluções operacionais, técnicas e comportamentais para reduzir as emissões a partir de 2025. As progressões esperadas, que seja em torno de 780 Mt.CO₂ até 2030 e cerca de 470 Mt.CO₂ até 2040, conforme previsto o caminho das emissões líquidas zero, caso não ocorram interferências no setor (IEA, 2021a).

Além das preocupações com as mudanças climáticas, os altos preços e as incertezas no abastecimento de petróleo, esse cenário favoreceu o crescimento de novas tecnologias para energia renovável, que proporcionem maior eficiência em processos de conversão. Neste cenário, tanto a produção quanto o consumo de etanol e biodiesel, têm progredido de forma eficiente nas últimas décadas. A evolução da produção global de biocombustíveis é mostrada na Figura 2.1. A produção dos biocombustíveis, espera-se seja 7% maior em 2022 do que em 2021 do consumo global de energia para movimentar pessoas e bens (IEA, 2021b).

Figura 2.1 – Produção de biocombustíveis por país/região e tipo de combustível, 2016-2022



Fonte: IEA, 2023

2.1.2 Biocombustíveis Alternativos e Combustíveis Sintéticos

As oportunidades para reduzir as emissões de carbono da aviação por meio de melhorias na tecnologia ou nas operações das aeronaves são limitadas e possuem dificuldades em acompanhar o crescimento projetado da demanda, muito menos em reduzir as emissões atuais, como planejado. Assim, estudos indicam que a única maneira da demanda da aviação continuar a crescer, sem aumentar as emissões de dióxido de carbono, é por meio do uso de biocombustíveis alternativos de baixa emissão de CO₂ ou sintéticos (KLÖWER *et al.* 2021).

Nos últimos anos, combustíveis alternativos com menor pegada de carbono, principalmente produzidos a partir de biomassa, foram certificados para uso, mas ainda não estão amplamente disponíveis com preço acessível (HARI *et al.*, 2015; CAPAZ *et al.*, 2021). Além disso, os combustíveis alternativos de biomassa possuem diferentes pegadas de carbono resultantes das emissões do ciclo de vida para diferentes métodos de produção e mudanças associadas ao uso da terra, o que limita o potencial de mitigação das mudanças climáticas (ERCAN *et al.*, 2021).

A mitigação ocorre em grande parte por substituição de combustível – biocombustíveis de baixo carbono e combustíveis sintéticos, com uma contribuição menor da tecnologia. Aproximadamente 85% das emissões cumulativas reais de CO₂ (até 2070) são atribuídas ao uso de combustível.

O desenvolvimento de *SAF* (*Sustainable Aviation Fuel*) reduz a emissão de carbono na aviação, o que faz aumentar o interesse e pesquisa nessa área. Os combustíveis de aviação alternativos, que substituem o querosene de combustível fóssil, devem ser certificados para padrão semelhante ao *Jet-A*, pois são necessários vários aspectos de segurança. Atualmente, a *ASTM* (*American Society for Testing and Materials*), organização responsável pelos padrões de combustível de aviação, certificou sete diferentes combustíveis de aviação sustentáveis com uma mistura máxima de 10-50% (CHIARAMONTI, 2019).

Esses requisitos de misturas limitam efetivamente a quantidade de combustível não hidrocarboneto, como o metanol, sendo este, até o momento, o único combustível certificado que pode ser adicionado ao QAV. Isto porque o combustível de aviação precisa conter, obrigatoriamente, uma quantidade mínima de hidrocarboneto aromático para evitar o encolhimento dos anéis de vedação (*O-ring*) utilizados na vedação do tanque de combustível, pois seu encolhimento pode causar vazamentos (KHANDELWAL *et al.*, 2018). Esse nível mínimo de hidrocarbonetos, provavelmente, poderá ser diminuído a médio e longo prazos, pois proporciona alguns benefícios adicionais de redução tanto na geração de fuligem quanto na formação de trilhas de vapor condensado de água (*contrail = condensation trail*) (BIER *et al.*, 2017; BIER E BURKHARDT, 2019).

Os biocombustíveis, podem ser produzidos a partir de uma variedade de matérias-primas, incluindo as cultivadas, resíduos de colheitas, resíduos sólidos urbanos, resíduos de graxa, óleos e gorduras, produtos de madeira e resíduos florestais (STAPLES *et al.*, 2018). Cada uma dessas diferentes fontes, podem influenciar nos níveis de emissões associadas ao ciclo de vida da matéria-prima. Portanto, essas emissões de dióxido de carbono, não são próximas de zero, mas têm emissões associadas a outros GEEs, provenientes de sua produção e distribuição (STAPLES *et al.*, 2017).

Outras questões de sustentabilidade incluem debate do uso de alimentos *vs* combustíveis, aplicação de recursos hídricos e impactos na biodiversidade. A produção econômica, a disponibilidade de matérias-primas e os custos de certificação também são fatores importantes (HARI *et al.*, 2015). No entanto, estima-se que os *SAFs* de base biológica atinjam reduções de emissões do ciclo de vida na faixa de 2 a 70% em diferentes cenários (STAPLES *et al.*, 2018).

Kousoulidou e Lonza (2016) estimaram que a demanda de combustível, em 2030, seria de aproximadamente 100 Mtep (Milhões de toneladas equivalentes de petróleo). A inserção do bioquerosene (HEFA/HVO) forneceria cerca de 2% da demanda total de combustível naquele ano. A distribuição do biocombustível na aviação é limitada por várias questões, a maior delas é o preço atual dos combustíveis fósseis em comparação com os custos de produção do *SAF*

(CAPAZ *et al.*, 2021). Outras rotas híbridas, como a hidrogenação de biocombustíveis (presumivelmente hidrogênio produzido com energia de baixo carbono) possibilitam aumentar a produção e melhorar a viabilidade econômica de *SAFs* de base biológica (HANNULA, 2016; ALBRECHT *et al.*, 2017).

O custo continua sendo uma grande barreira para o *bio-SAF*, cerca de três vezes o preço do querosene (KANDARAMATH *et al.* 2015). As grandes mudanças nos preços ou políticas dos combustíveis fósseis devem ser adotadas para que o *SAFs* sejam economicamente competitivos. Staples (2018) e colaboradores estimam que, com a implantação do *bio-SAF*, as emissões de GEE serão reduzidas em pelo menos 50% até 2050, exigindo políticas de preços e incentivos. Eles estimaram que, entre 2020 e 2050, seriam necessárias 268 novas biorrefinarias por ano, com um investimento de capital de aproximadamente US\$ 22 bilhões a US\$ 88 bilhões (preços de 2015). Wise *et al.*, (2017) sugerem que uma alta no preço do petróleo poderia alavancar a produção e a disponibilidade de *bio-SAF's*

2.2 MOTIVAÇÕES E ACORDOS

Assim como todas as áreas que envolvem atividade humana, o transporte aéreo impacta diretamente o meio ambiente. Esse impacto negativo contribui diretamente nas emissões de gases causadores do efeito estufa e conseqüentemente nas mudanças climáticas. Em 2018, a aviação civil mundial emitiu em torno de 905 milhões de toneladas de CO₂. Esta emissão representa 2,4% do total de emissões antropogênicas de CO₂ e as previsões são que ela cresça para 3% até 2030 (IATA, 2019b).

Para reduzir a emissão de gases causadores do efeito estufa, o Protocolo de Kyoto foi elaborado em 1997, sendo pioneiro nos acordos internacionais. O acordo serviu para criação de metas, buscando diminuir a emissão de CO₂, emitidos principalmente pelos países desenvolvidos. No entanto, este acordo só entrou em vigor em 2008, pois muitos países, inclusive os Estados Unidos, acreditavam que os países em desenvolvimento deveriam arcar com sua carga de poluição. Outro acordo importante, que gera impacto diretamente para a aviação, foi o Acordo de Paris, que cobre as emissões de CO₂ da aviação doméstica (atualmente 35% das emissões globais) por meio da Contribuição Nacionalmente Determinada (NDC, na sigla em inglês para *Nationally Determined Contribution*), mas não as emissões internacionais. Vários países, incluindo Reino Unido, França, Suécia e Noruega, anunciaram planos para adicionar o transporte aéreo internacional às suas demandas de emissão zero. Enquanto a EU (União Europeia), Nova Zelândia e Dinamarca estão considerando fazer o mesmo (IPCC, 2019).

O Acordo de Paris estabelece metas baseadas na temperatura, por isso não está claro como as emissões de gases de efeito estufa do tráfego aéreo internacional seriam contabilizadas.

Notoriamente, esta situação é considerada abaixo do ideal para nível de importância que os governantes tratam as emissões internacionais de gases de efeito estufa da aviação. Na sua 40ª Assembleia Geral em outubro de 2019, a ICAO (*International Civil Aviation Organization*) pediu ao Conselho que continuasse a explorar a viabilidade de uma meta global, de longo prazo, para a aviação internacional. Estudos detalhados, avaliam as metas e o impacto desses intentos propostos, inclusive o impacto no crescimento econômico e nos custos em todos os países, especialmente nos países em desenvolvimento (IPCC, 2022).

Medidas de compensação baseadas no mercado, no ano de 2012, a União Europeia tornou o transporte aéreo parte do Sistema de Comércio de Emissões de CO₂ (*ETS-Emissions Trading System*). Atualmente, o EU-ETS cobre todos os voos dentro da UE, assim como países do Espaço Econômico Europeu (EEE). Globalmente, a ICAO concordou, em 2016, com o lançamento do CORSIA (*Carbon Offsetting and Reduction Scheme for International Aviation*) para o ano de 2020. Devido à pandemia, resultou na alteração com estudo com base no ano de 2019.

O CORSIA incentiva a mudança de combustíveis fósseis e com alta emissão de gases de efeito estufa por biocombustíveis, o que será implementado em fases. Na fase piloto (2021-2023) e na primeira fase (2024 -2026), os países participam voluntariamente. A segunda fase ocorrerá de 2026 a 2035, com a participação de todos os estados, salvo alguma exceção. Os países podem obter uma isenção se seu desempenho na aviação for inferior ou se for baseado em seu *status* de desenvolvimento da ONU. Em setembro de 2021, 109 países membros da ICAO participaram voluntariamente do CORSIA. Em relação às rotas, serão incluídas apenas aquelas em que ambos os países participem. Uma revisão especial do CORSIA será realizada antes do final de 2032 para determinar a sua continuação, o seu término ou outras mudanças no esquema para além de 2035 (IPCC, 2022).

O Brasil, um país voluntário do acordo, possui o RenovaBio que é um programa de política nacional voltado para a matriz energética de biocombustíveis, que apresenta metas de Descarbonização; Certificação da Produção de Biocombustíveis; Crédito de Descarbonização (CBIO). O programa contribui de forma direta para diminuição de CO₂, além da comercialização e produção dos biocombustíveis que gera impactos ambientais, com investimentos na área de pesquisa de R\$1 trilhão no setor de biocombustíveis até 2030 (RenovaBio, 2022).

2.3 ROTAS TECNOLÓGICAS CERTIFICADAS

A definição de rotas tecnológicas, também conhecida é como *pathways*. De acordo com Fleck (1990) denota que as mudanças ocasionadas no meio tecnológico, através das inovações

tecnológicas, proporcionam o surgimento de rotas em múltiplas áreas do conhecimento. A especificação é uma rota desenvolvida para aquela área técnica, não obstante da dificuldade. Por conseguinte, essa ideia está embasada em convenções que visam o desenvolvimento tecnológico com união da economia, social e técnicas. Desse modo, as rotas tecnológicas podem representar diferentes vias, mas apresentam os mesmos caminhos, com significância semelhante e objetivo de alcançar padrão tecnológico.

A escolha da melhor rota, requer uma série de fatores, mas sendo indispensáveis conhecer as matérias-primas, com pesquisas e sendo essencial o processamento de refino para geração do biocombustível de aviação. Neste momento, existem diversas rotas de produção com certificação internacional, pelas normas ASTM D7566 para uso em transporte comercial. Posteriormente, a primeira etapa de tratamento ou pré-tratamento das matérias-primas, estão sujeitas a diferentes tipos de processos, os quais são classificados como rotas de conversão bioquímica, lipídica e termodinâmica (BOEING *et al.*, 2013).

A regulamentação das rotas, as quais são certificadas pela ANP, cuja a principal finalidade para uso do bioquerosene que atendam as normas para *bio-jet fuels*, os quais são misturados com combustíveis derivados do petróleo. Sendo assim, a concessão para misturar em porcentagem potencial máxima da fração de *biojet* poderia ser aumentada de 15% para cerca de 50% ao querosene de aviação, denominados de Querosenes Parafínicos Sintetizados (SPK em inglês) (PEARLSON, 2011). A maior parte dos *biojet fuels*, são produzidos por meio da rota HEFA/HVO. No entanto, essa rota possui um custo elevado de cerca de 3 a 6 vezes maior que o combustível convencional (IRENA, 2021).

2.3.1 SPK-HEFA: Querosene Parafínico Sintetizado via Hidroprocessamento de Ésteres/Ácidos graxos

A base para produção desse bioquerosene, é usando óleos através das biomassas também denominados de óleos vegetais hidrogenados (HVO em inglês), são produzidos de forma semelhante ao processo convencional de refino para querosene de aviação. A utilização de hidroprocessamento dos lipídios, particularmente extraídos de gorduras e óleos (plantas, animais ou microbianas) implica na adição de hidrogênio para conversão de hidrocarbonetos, ou seja, aplicado desoxigenação e hidrogenação catalítica.

Nesse processo de conversão dos lipídios, em hidrocarbonetos saturados, ou parafinas sintéticas via de desoxigenação de ácidos graxos contendo reações em fase gasosa e líquida. As reações de fase líquida, ocorrem de forma simultânea com a descarbonilação. Essa reação, produz hidrocarbonetos olefínicos, mediante a retirada do grupo carbonila, gerando subprodutos CO e H₂O. A descaboxilação, têm a remoção do grupo carboxílico dos ácidos

graxos, causando a liberação da molécula de CO₂, que conseqüentemente, forma uma molécula de hidrocarboneto parafínico (BRUCE, 2017).

Para produção de querosene de aviação, gasolina, diesel e nafta, as parafinas são parcialmente quebradas e passam pela isomerização. Dessa forma, com a remoção de H₂, gera ramificações na cadeia de hidrocarbonetos para melhorar as propriedades de fluxo frio. Todo o processo preparado para combustível alternativo, conhecido como *drop-in* dentro do mercado de fontes renováveis, tende a ser regulamentado na demanda das especificações exigidas (KAUL *et al.*, 2012).

- Saturação das ligações duplas de carbono com hidrogênio e removendo o oxigênio como água;
- Remoção do propano com a formação de 3 moléculas de ácidos graxos;
- Na fase gasosa, a desoxigenação de ácidos graxos saturados acontece por meio da descarboxilação via indireta e hidrogenação direta para a produção de n-alcenos.;
- A razão entre as reações de HDO e descarbonilação/ descaboxilação é na proporção de 35/65.

As matérias-primas, são parte mais cara do processo, podendo representar mais de 70% do custo total do processo, pois os preços dos óleos vegetais condizem com crescimentos dos preços do petróleo. Comparando os investimentos, com uso de hidrocessamento, visto de custo menor ao processo Fischer-Tropsch (OVALLES *et al.*, 2011).

2.3.2 SPK-ATJ: Querosene Parafínico Sintetizado via Álcoois por “*Alcohol To Jet*”

A sintetização por álcool é formulada por três processos. A matéria-prima para preparo, advém da fermentação de álcoois por meio do açúcar e da amilácea. Dessa forma, os álcoois produzidos através da desidratação, oligomerização e hidrogenação, possui na estrutura ligações moleculares de cadeias curtas, para gerar hidrocarbonetos eficazes na aplicação para bioquerosene.

No momento atual, existe emprego de algumas reações químicas que contribuem para a oligomerização álcoois. O uso do etanol e isobutanol nesses processos, são removidos a água e/ou oxigênio pela desidratação das moléculas de álcool, fornecem alcenos de cadeia curta. Posteriormente é adicionado o hidrogênio devido a diminuição do volume inicial para produzir um *bio jet-fuel* mais caros (STREET *et al.*, 2012).

Para o processo ATJ aprovado pela ASTM, são aceitos para mistura de até 50% no qual precisa de subsídios, que envolve a matéria-prima do açúcar, acarretando no aumento dos preços desse mercado. Apesar disso, a utilização de resíduos industriais disponíveis, advindo de outras fontes como açúcar celulósico ou álcool de baixo custo, reduzem os riscos comerciais.

Os intermediários de álcool podem ser metanol, etanol, butanol, isopropanol, outros álcoois ou uma mistura deles (CORTEZ, 2014).

A principal vantagem com relação aos custos, principalmente a redução das etapas do processo de operação. A distribuição de Schultz-Flory, rege as condições de sínteses que atuam diretamente nas porcentagens de hidrocarbonetos sintetizados, assim como a funcionalidade dos catalisadores nas etapas de propagação e terminação da cadeia (ANDERSON, 1984; PICHLER, H.; SCHULZ, H.; ELSTNER, M. 1967; FLORY, 1936). Geralmente são utilizados catalisadores ácidos como SAPO, HZSM-5 e heteropoliácidos.

O processo ATJ, possui algumas desvantagens, como resistência à água e desativação do catalisador pela geração de coque e perda de sítios ativos por decomposição térmica (DALLA COSTA *et al.*, 2016). Assim, como condições que atinjam altas convenções e seletividade na faixa do querosene sem apresentar alto teor de aromáticos, não ultrapassando 25%.

2.3.3 SPK-FT: Querosene Parafínico Sintetizado via Hidroprocessamento por Fischer-Tropsch

O Fischer-Tropsch, utiliza a biomassa lignocelulósica, para produção por meio de gaseificação, dando sequência na limpeza do gás de síntese sobre catalisadores específicos. Os gases de síntese, geram o monóxido de carbono e hidrogênio (CO e H₂). A conversão em parafinas, acontece em elevadas temperaturas, através do crescimento das cadeias de carbono, utilizando catalisadores metálicos suportados (ferro e cobalto) para reação. As parafinas, passam pelo processo de craqueamento e isomerização tendo produto, hidrocarbonetos similares com combustível fóssil de aviação (LIU *et al.*, 2013). O processo é aprovado para uma mistura de 50% pela ASTM.

O processo de FT, têm as n-parafinas, como principal produto das reações altamente exotérmicas e baixa geração de aromáticos. A quantidade máxima permitida é 8%, assim como alguns destilados médios como gasóleo e *jetfuels*, com valores insignificantes de enxofre (LECKEL, 2011). A diminuição dos aromáticos, aumenta tanto o calor de combustão, como calor específico, mas em contrapartida, apresentam redução na densidade, viscosidade e condutividade térmica. O ponto positivo, que os aromáticos são ideais para funcionamento da mecânica das aeronaves, com a lubrificação dos motores (MOSES, 2008; PIRES *et al.*, 2018).

Uma outra forma de processo da síntese Fischer-Tropsch com aromáticos, SPK-A, produz uma mistura de hidrocarbonetos pela reação de alquilação dos aromáticos leves, principalmente o benzeno. Aplicação de prevenção de vazamento do combustível, deve sobretudo aos compostos aromáticos, que garantem uma boa proteção elastomérica nos

componentes do sistema de combustível do avião, mas sem exceder 20% da composição (NEULING & KALTSCHMITT 2018).

As exigências do mercado, assim como as normas comerciais para combustíveis, principalmente com a mistura líquida de hidrocarbonetos, são separadas em etapas. As etapas de conversão, incluem a redução das moléculas de peso molecular mais alto, em moléculas de hidrocarbonetos de peso molecular mais baixo ou inclusão de outros compostos, encontradas no combustível do refino tradicional de petróleo, para facilitar as propriedades específicas do QAV (BARTHOLIC, 2000).

2.3.4 SPK-SIP: Querosene Isoparafínico Sintetizado via Fermentação de Açúcares

O combustível é certificado pela ASTM D-7566, para uso em uma mistura de 35% com diesel de petróleo. Aplicação do processo de sintetização, por meio da fermentação de açúcares hidroprocessados, recebeu o nome de farneseno, também chamado comercialmente de diesel verde ou diesel de cana de açúcar. Esse *bioconverter* direto em farnesano (DOUGLAS *et al.*, 2007) pode conter hidrocarboneto parafínico ramificado, incluindo 15 carbonos, com as características esperadas para combustíveis de aviação (RADICH, 2015; CONCONI, 2016).

A produção do biocombustível, é aplicada a hidrogenação na matéria-prima de farneseno, sendo adicionado com o hidrogênio em um leito catalítico, etapa primordial para redução dos limites duplos. A separação do líquido/gás a partir do fracionamento, com intuito de remoção do hidrogênio dos compostos hidrogenados derivados e na separação do farneseno, serve para cumprir as especificações do querosene de aviação. A vantagem, frente aos combustíveis convencionais, é que suas propriedades, são de componente puro e não de misturas, que impeçam a identificação compatíveis das moléculas em análise de combustão (KIM; VIOLI, 2018).

O farneseno, se destaca na questão ambiental, por ser um combustível livre de impurezas, como enxofre e composto aromáticos e apresenta uma menor emissão de particulados, durante o processo de combustão. Quando submetido as baixas temperaturas, ocorre estabilidade oxidativa maior, que comparado ao biodiesel e baixa taxa de degradação no decorrer do tempo de estocagem e transporte (SANTOS, 2013; RIBEIRO *et al.*; 2015)

A empresa Amyris, utiliza uma mistura de 20% de farneseno DSCH, 30% de hidrocarboneto C₁₀ e 50% de combustível de aviação. As pesquisas do grupo, implica em estudos de propriedades físico-químicas e bases específicas de combustível, em conformidade com ASTM D1655 e ASTM D756. Dessa forma, buscam a qualificação ASTM para uma baixa mistura de farneseno no Jet A/A-1. O resultado das pesquisas, resulta na preparação da proposta de especificação de combustível ASTM DSHC₁₀ (CORTEZ, 2014).

A produção do farneseno, apresenta um baixo custo em relação a grande variedade de matérias-primas, as quais demonstram potencial para serem aplicadas no processo, sem que ocorra concorrência, com as usadas na alimentação e nem requerer uma alta gasto energético. Por essa razão, em quantidade, 3 kg de sacarose são convertidos em 1 kg de farneseno, considerando, 100% de conversão biológica, purificação com zero perdas e de eficiência da etapa de hidrogenação (4 moléculas de H₂ para cada farneseno). Porém, a etapa de hidrogenação tem alto custo, o que acarreta um processo de produção mais caro comparado ao SPK-HEFA de aviação (YAAKOB *et al*, 2015; NEULING & KALTSCHMITT, 2018).

2.4 BIOQUEROSENE

O bioquerosene, de acordo com a definição da Rede Brasileira de Bioquerosene e Hidrocarbonetos Sustentáveis para Aviação (RBQAV), é um combustível renovável composto por uma mistura de hidrocarbonetos, tanto lineares quanto cíclicos. Sua composição é semelhante à do querosene de origem fóssil.

A resolução nº 778 de 2019 da Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP), define o bioquerosene de aviação, ou querosene de aviação alternativo, como um combustível derivado de fontes alternativas, como biomassa, gases residuais, resíduos sólidos, carvão e gás natural. Esse tipo de combustível pode ser utilizado em turbinas aeronáuticas ou, de acordo com as regulamentações, em outras aplicações que visem substituir parcial ou totalmente o combustível de origem fóssil. A resolução também estabelece que o bioquerosene pode ser adicionado ao querosene de aviação, em um limite máximo de 50% em volume (ANP, 2022).

A fim de fornecer desempenho similar ao querosene sem a necessidade de alteração nos motores e na distribuição e armazenamento de combustível, a indústria tem apostado em biocombustíveis do tipo *drop-in*. Esses biocombustíveis são definidos como bio-hidrocarbonetos líquidos que são funcionalmente equivalentes aos combustíveis tradicionais e totalmente compatíveis com a infraestrutura petrolífera existente. Isso permite que sejam utilizados sem a necessidade de modificar motores, sistemas de distribuição ou armazenamento de combustível. Dessa forma, facilita a transição para fontes de energia mais sustentáveis, mantendo a eficiência e a praticidade das soluções convencionais (IEA, 2022b)

Além da vantagem de não exigir grandes alterações na infraestrutura existente, os biocombustíveis *drop-in* apresentam benefícios ambientais. Eles são produzidos a partir de fontes renováveis, como biomassa, óleos vegetais ou resíduos agrícolas, reduzindo assim a dependência de combustíveis fósseis e diminuindo as emissões de gases de efeito estufa. Essa transição para biocombustíveis sustentáveis também contribui para a redução da poluição do ar

e melhoria da qualidade do ar, uma vez que eles emitem menos poluentes nocivos em comparação com os combustíveis convencionais.

A produção de bioquerosene pode ser viabilizada através de diversas matérias-primas, tais como açúcares, amido, óleos, biomassa e materiais residuais. Plantas como cana-de-açúcar, soja, eucalipto, pinhão manso, babaçu e mamona são algumas das opções adequadas. É importante que a matéria-prima seja disponível em escala produtiva, sem ameaçar a biodiversidade ou causar interferência nos ecossistemas naturais. Além disso, é preferível que a produção de bioquerosene não necessite de grandes quantidades de insumos agrícolas e que não entre em competição com a produção de alimentos. Garantir esses critérios é essencial para alcançar uma produção sustentável e viável de bioquerosene.

Com o processo produtivo, a matéria-prima é transformada em hidrocarbonetos semelhantes aos encontrados no combustível fóssil. Durante a queima, o combustível resultante também gera CO₂, porém, o impacto é mitigado durante o ciclo produtivo. Isso ocorre porque, em geral, a matéria-prima utilizada é proveniente de plantas que absorvem o gás carbônico, compensando assim as emissões de carbono liberadas para a atmosfera durante a queima (BETIOLO, ROCHA e MACHADO, 2009).

Os substratos que possuem tamanhos de cadeia semelhantes aos destilados de querosene fóssil de aviação, contendo entre 8 e 16 átomos de carbono, têm sido foco para a obtenção de bioquerosene. Estudos têm sido realizados com bioquerosene produzido a partir de óleos refinados de frutos de palmeiras, como a amêndoa de babaçu e a polpa do coco, que consistem em mais de 60% de óleo, predominantemente compostos por ácidos graxos de cadeias carbônicas intermediárias (C6 a C16). Dentre esses ácidos, destaca-se o ácido láurico, representando de 40 a 55% da composição e contendo 12 átomos de carbono. O ácido láurico, classificado como um ácido saturado devido às suas ligações simples entre carbonos, é resistente à oxidação térmica e possui baixa temperatura de fusão, o que o torna ideal para a geração de biocombustível de aviação (ARAUJO, 2014; CORREIA *et al.*, 2014; DZIDA *et al.*, 2013; LOTTENBERG, 2009; HONG *et al.*, 2013).

2.5 MATÉRIAS-PRIMAS POTENCIAIS

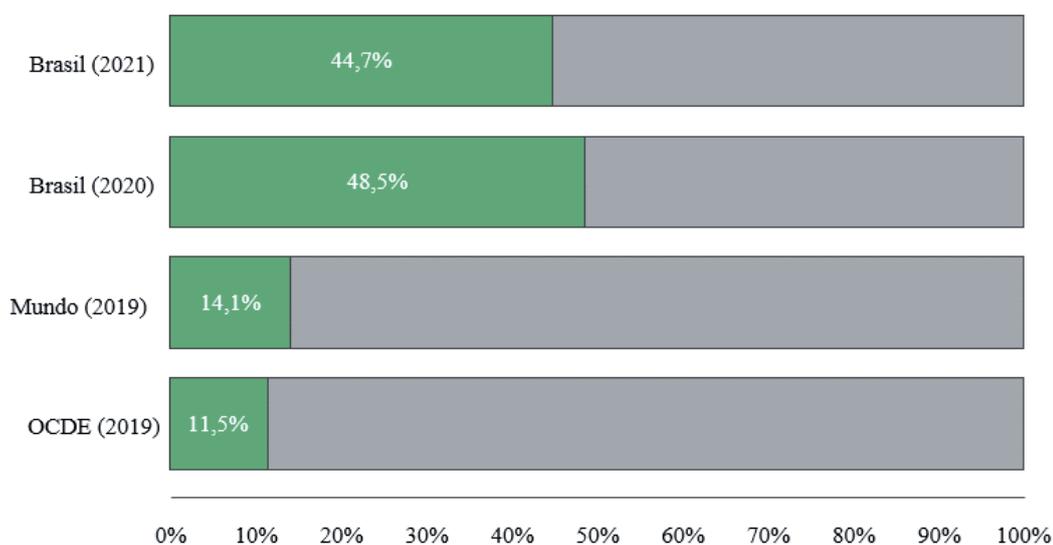
A biomassa é classificada como matéria de origem carbônica, derivada de organismos, que incluem resíduos agrícolas, florestais, cana-de-açúcar, mamona, soja, gorduras animais, lixo orgânico etc. A utilização da biomassa, como medida sustentável para a demanda energética no planeta, tanto no fornecimento de eletricidade e calor, como para produção de combustíveis. Nessa perspectiva, a aplicação da biomassa em biocombustíveis líquidos, torna-se possibilidade sustentável frente aos combustíveis fósseis, derivados do petróleo. O destaque

às redes de produção dos combustíveis como, diesel verde, da biogasolina e atualmente do bioquerosene (FONSECA, 2019).

A biomassa lignocelulósica, apresenta componentes químicos naturais na composição como, a celulose, hemiceluloses e lignina, com quantidade baixa de outras substâncias as cinzas, extrativos, além de proteínas e amido. A concentração dos componentes, dependem especificamente do tipo de biomassa (EICHLER *et al.*, 2015). A composição química da biomassa lignocelulósica, geralmente contém 35-50% de celulose, seguido de 20-35% de hemicelulose, 10-25% de lignina, esses valores levam em consideração a idade da planta e das condições de crescimento. A quantidade das composições químicas, como umidade, ponto de cinza e poder calorífico, são essenciais para escolhas do tipo de conversão da biomassa (FENGEL & WEGENER, 2011; GALINDO *et al.*, 2014)

A maior parte dos combustíveis consumidos no mundo, são originários de fontes fósseis e não renováveis, onde as energias renováveis estão caminhando e conquistando espaço de forma tímida. A Figura 2.2, apresenta um comparativo de comportamento no Brasil e mundialmente para energias renováveis na matriz energética.

Figura 2.2 – Participação de renováveis na matriz energética

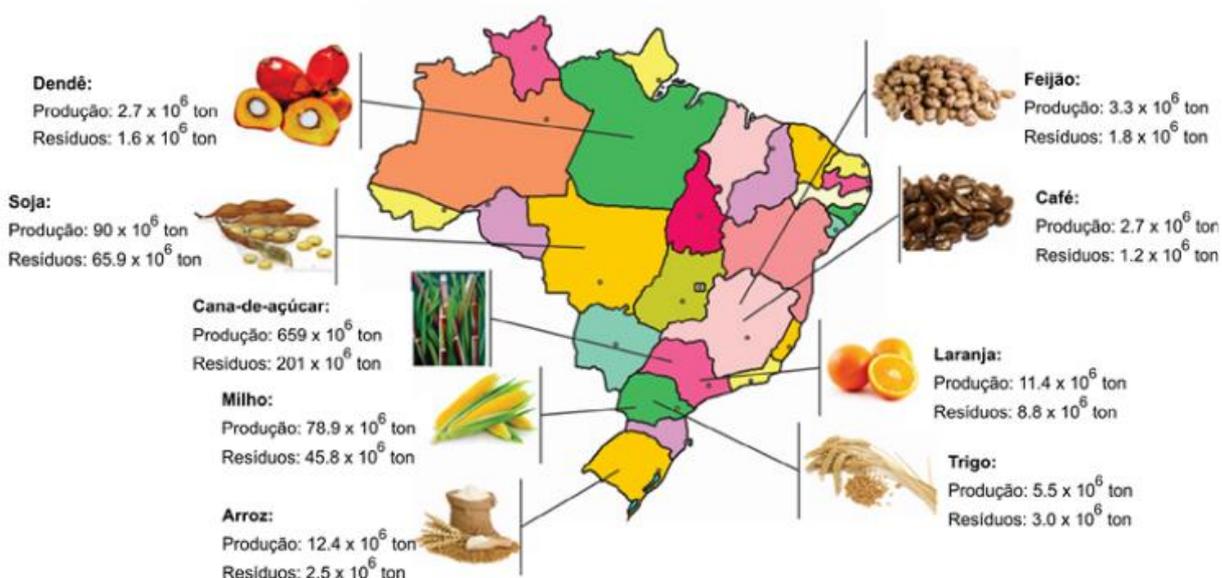


Fonte: EPE, 2023

Como observado nos dados do Relatório de Síntese da EPE (Empresa de Pesquisa Energética) para ano de 2022. No Brasil, as energias renováveis estão sendo aplicadas em uso de forma significativa, que corresponde a 48,5% da matriz energética, no ano de 2020. Esse valor é relevante comparado mundialmente e de alguns países-membros da OCDE (Organização para a Cooperação e Desenvolvimento Econômico), onde as energias renováveis correspondem por 14,1% e 11,5% respectivamente.

O Brasil, apresenta grande variabilidade de matérias-primas, em questão de diversidade nas fontes de produção por extensão territorial para biocombustíveis para a aviação. O país possui experiência na área da agricultura, em produção de biocombustíveis como na cultura da cana-de-açúcar, que corresponde 50% da produção para fabricação do etanol. O mesmo acontece na produção do biodiesel à base de soja, onde consome cerca de 26% do cultivo produzido (BOEING *et al.*, 2013). A evolução das matérias-primas, melhora a capacidade de preparo dos biocombustíveis nacionais, cuja planta apresenta na composição amidos e açúcares, as oleaginosas, de forma mais visionária os rejeitos industriais e das cidades. Na Figura 2.3 são apresentados alguns produtos agrícolas característicos do Brasil com sua respectiva produção e resíduos gerados.

Figura 2.3 – Avaliação de produção agrícola no Brasil e sua respectiva geração de resíduos



Fonte: Bellote *et al.*, 2018

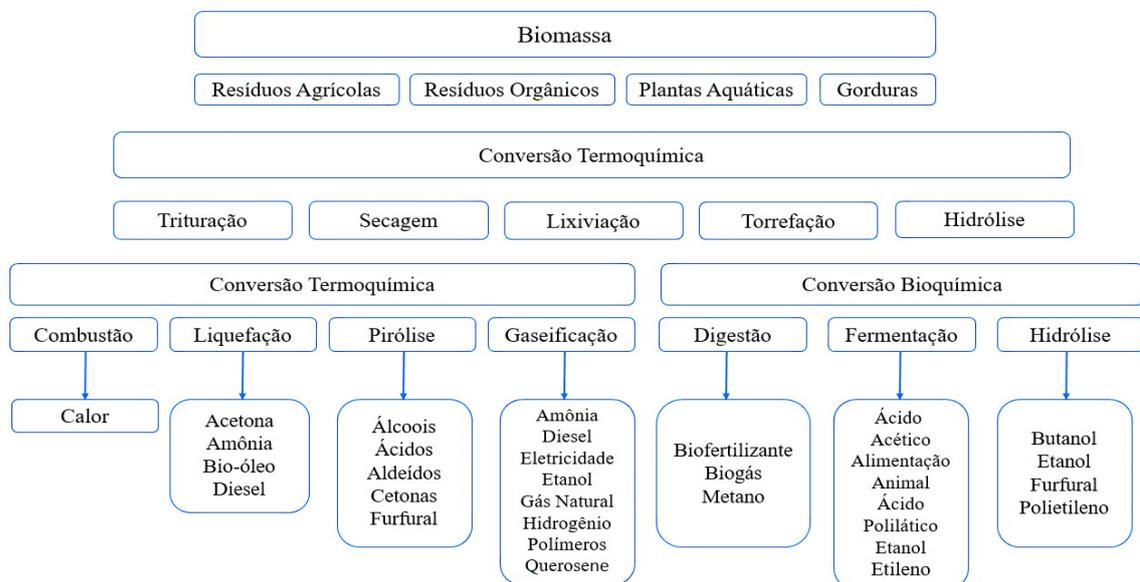
A partir disso, os processos de produção mais viáveis e de baixo custo dos biocombustíveis de aviação, são preparados utilizando óleos como fonte de matéria-prima. Assim, a extração dos óleos vegetais como gorduras ou lipídeos, por pode ser extraído através das sementes. Esses óleos, são basicamente formados pelos triacilgliceróis (ligação de três ácidos graxos com uma molécula de glicerol), por isso reforça caráter apolar, se torna solúvel apenas em solventes orgânicos e insolúveis em água (RODRIGUES, 2011).

A produção de biodiesel, emprega os óleos comestíveis como matéria-prima. No entanto, o custo elevado desses óleos, comparado ao processo total, com custos da matéria-prima e geração do glicerol, fica inviável para comercialização em larga escala (KULKARNI,

et al., 2006). Os óleos vegetais mais extraídos são, de milho, palma, canola, girassol, amêndoa, azeitona, óleos de cártamo, coco e soja. Em pesquisa o óleo de palma, configura 33% da produção mundial dessa área de óleos vegetais voltados para consumo e sucessivo de 27% do óleo de soja (BHATIA *et al.*, 2006).

A biomassa é transformada, principalmente em biocombustíveis ou eletricidade através de algumas rotas de conversão (Tabela 2.1). A desvantagem do processo é a baixa densidade energética comparada com quantidade de biomassa, assim como manuseio, armazenamento e transporte são diferentes comparados aos combustíveis líquidos ou gasosos. A conversão da biomassa mais utilizada é a combustão (Figura 2.4). Os produtos deste processo geram gases como CH₄, CO₂, além de alguns gases inertes e compostos sulfurosos.

Figura 2.4 – Principais rotas de conversão da biomassa



Fonte: Adaptado de Rocha, 2015

As duas rotas de conversão da biomassa lignocelulósica, para biocombustíveis, são a rota termoquímica e a rota bioquímica, assim como mostrado na Figura 2.4. A rota bioquímica (hidrólise + fermentação), no qual utilizam a conversão de microrganismos ou enzimas como catalisadores. A rota termoquímica por meio da pirólise e/ou a gaseificação da biomassa, para obtenção do gás de síntese, com processo da síntese catalítica ou da fermentação, sendo favorável para a obtenção de hidrocarbonetos, álcoois, hidrogênio, amônia e GNS (Gás Natural Sintético) entre outros compostos. Assim, os processos pertencentes a essa rota são denominados de processos BTL (*Biomass to Liquid*). Na Tabela 2.1 apresenta um panorama de algumas técnicas de conversão da biomassa, assim como do tipo de matéria-prima e sua eficiência de conversão.

Tabela 2.1 – Diferentes técnicas de conversão de biomassa

Método de conversão	Matéria-prima	Eficiência (%)	Produto final
Combustão	Biomassa ligoceululósica	10-40	Energia térmica
Digestão anaeróbica	Biomassa úmida	20-40	Gás com CH ₄
Extração mecânica	Biomassa oleaginosa	88	Óleo vegetal
Fermentação Aeróbica	Açúcares e amidos	43	Etanol
Fermentação Aeróbia	Biomassa ligoceululósica	46	Etanol
Fermentação Anaeróbia	Biomassa úmida	20	H ₂
Fotólise	Biomassa úmida	25	H ₂
Gaseificação	Biomassa ligoceululósica	63-85	Syngas
Gaseificação Supercrítica	Biomassa úmida	44-65	Syngas/CH ₄
Liquefação	Biomassa ligoceululósica	55-79	Bio-óleo
Pirólise	Biomassa ligoceululósica	<80	Biocombustíveis

Fonte: Adaptado de Toonss, 2010

2.6 GASEIFICAÇÃO

A gaseificação consiste em conjunto de reações complexas aplicadas ao processo de conversão termoquímica de um material carbonífero (sólido ou líquido) em combustível gasoso, produzido em ambiente com condições específicas de temperatura e pressão, os quais reações termoquímicas numa faixa de temperaturas de 700 a 1500°C, e em pressões atmosféricas que podem variar até 33 bar. Os agentes de gaseificação empregados no processo podem ser oxigênio, ar, vapor de água ou em uma mistura, respeitando a quantidade estequiométrica. Todo processo e os parâmetros citados estão condicionados aos tipos de reatores de gaseificação (BASU, 2018b).

A gaseificação de biomassa, difere da combustão, pois incapacita a oxidação completa do carbono e hidrogênio encontrados nos produtos do combustível em CO₂ e H₂O, respectivamente, dos quais são a matriz para compostos combustíveis, bem como CO, H₂ e CH₄. Assim como os gases aludidos anteriormente, o gás também engloba produtos provenientes da combustão, sendo o CO₂, H₂O e O₂ em proporções mínimas e N₂ a partir do

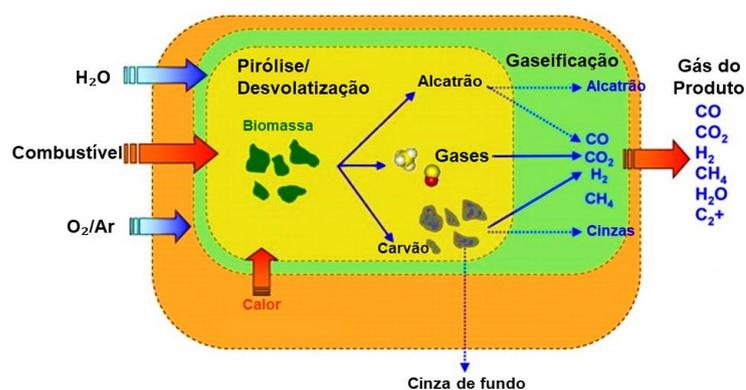
agente gaseificador de ar. A mesma forma que, possuem quantidades menores de hidrocarbonetos, tais como o eteno (C_2H_4), o etano (C_2H_6), entre outros (WARNECKE, 2000; de LASA *et al.*, 2011).

2.6.1 Reações químicas do processo de gaseificação

A aplicação do método termoquímico para obtenção de combustível sendo ele de fonte orgânica, assim como a o processo de gaseificação da biomassa pode ser subdividido nas seguintes etapas de conversão: secagem, pirólise (desvolatilização), combustão (oxidação) e gaseificação (redução).

A Figura 2.5 mostra um esquema das etapas do processo de gaseificação de biomassa. Uma característica inerente de processamento que ocorre em série, isso demonstra que cada etapa não é distintamente separada, o que pode diferir é faixa de temperatura nas zonas de gaseificação. Na visão geral, primeiro acontece a secagem da biomassa através do aquecimento, depois passa pela decomposição térmica que se desenvolve em temperaturas próximas a $600^\circ C$, o que gera os produtos da pirólise. Na etapa de redução, os produtos reagem entre si e com o agente de gaseificação (ar, O_2 ou vapor), eles formaram os produtos finais da gaseificação (GÓMEZ-BAREA & LECKNER, 2010; MAZIARKA, *et al.*, 2022).

Figura 2.5 – Esquema etapas do processo de gaseificação de biomassa

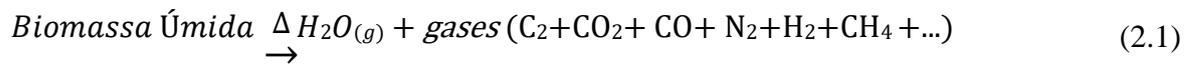


Fonte: Gómez-Barea & Leckner, 2010

2.6.1.1 Secagem

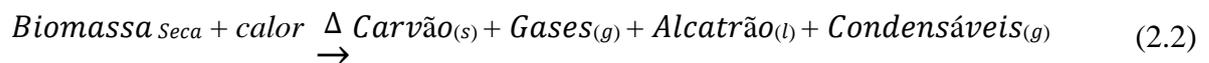
A secagem é primeira etapa da gaseificação, na qual a biomassa enfrenta o aquecimento ao entrar no gaseificador. Nessa etapa, o teor de umidade da biomassa é evaporado até alcançar valores inferiores a 5% (SIDEK *et al.*, 2022). Como ocorre as reações exotérmicas, a faixa de temperatura de $100\text{--}200^\circ C$ (PATRA & SHETH, 2015). Quando a temperatura ultrapassa $100^\circ C$, a água (H_2O) presente na biomassa é retirada, com aumento contínuo até atingir $200^\circ C$, começa a volatilização de compostos de menor peso molecular (BASU, 2018b). Dessa forma,

indica que um tempo operacional mais longo é necessário para remover a umidade presente na biomassa antes que a biomassa seja convertida em gás de síntese.



2.6.1.2 Pirólise

Posteriormente a etapa de secagem, principia a decomposição da biomassa por intermédio térmico liberados pelas reações endotérmicas, sem a presença do agente oxidante (O_2) e os materiais podem ser convertidos em produtos líquidos, carbonizados e gasosos. O processo da pirólise começa em torno de $200\text{ }^\circ\text{C}$ e transcorre até atingir uma faixa de temperatura de aproximadamente $600\text{ }^\circ\text{C}$. A desvolatilização, depende de alguns fatores primordiais da pressão e temperatura, que favorece na liberação de hidrocarbonetos com produtos gasosos como H_2 , CO , CH_4 , H_2O e CO_2 ; uma fração sólida, o carbono sólido e cinzas, composto intitulado de *char* e a diminuição da temperatura para líquidos como os alcatrões (*tar*) e hidrocarbonetos poliaromáticos (FAN *et al.*, 2019; BASU, 2018b; SIMEONE *et al.*, 2013).



2.6.1.3 Oxidação

Os provenientes da etapa da pirólise reagem com oxidante fornecido externamente. O agente oxidante mais comum aplicado é o O_2 , podendo ser forma pura ou a partir do ar, contudo tanto o CO_2 e vapor também são utilizados como oxidantes. A combustão trabalha com uma faixa de temperatura que inicia próximo de $700\text{ }^\circ\text{C}$, onde conforme o tipo de gaseificador pode alcançar até $1500\text{ }^\circ\text{C}$. As reações de oxidação, também conhecidas como combustão são de origem exotérmicas, homogêneas (reações gás–gás) ou heterogêneas (reações sólido–gás) são essenciais para gaseificação, pois fornecem energia térmica reações endotérmicas (secagem, pirólise e redução). O oxigênio (O_2) oferecido reage com as substâncias orgânicas encontrados no gaseificador, especialmente C , H_2 e CH_4 corroborando na geração de CO_2 e H_2O , em seguida são reduzidos em contato com carvão produzido na etapa da pirólise (DOHERTY *et al.*, 2009; LIANG *et al.*, 2022). As principais reações de combustão são mostradas na Tabela 2.2.

Tabela 2.2 – Reações de oxidação

Estequiometria	Nome de reação	Calor de reação (MJ/kmol)	Nº
Combustão do carbono (reações heterogêneas)			
$C + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO$	Combustão parcial	- 111,0	(2.3)
$C + O_2 \rightarrow CO_2$	Combustão completa	- 394,0	(2.4)
Oxidação dos voláteis (reações homogêneas)			
$C + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO_2$	Combustão parcial do CO	- 283,0	(2.5)
$H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O$	Combustão parcial do H ₂	- 242,0	(2.6)
$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO + 2H_2O$	Oxidação completa do CH ₄	- 803,0	(2.7)
$CH_4 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO + 2H_2$	Oxidação parcial do CH ₄	- 36,0	(2.8)

Fonte: de Lasa *et al.*, 2011; Arnold & Hill, 2019

2.7 GASEIFICAÇÃO EM LEITO FLUIDIZADO

O processo de gaseificação, ocorre em reatores chamados gaseificadores. Os reatores de gaseificação têm sido estudados há décadas, o que possibilitou uma gama de modelos, desde reatores de bancada, escala piloto até escalas industriais, ou seja, cada um com seu próprio conjunto de vantagens e desvantagens. A aplicação do reator para gaseificação da biomassa, depende do modelo requerido, levando em consideração a vazão mássica, assim como os parâmetros físico-químicos analisados. Segundo Kushwah (2022), um gaseificador adequado é escolhido com base nos seguintes fatores:

- Tipos de biomassa e teor de umidade;
- Tipos de agentes gaseificação (ar, O₂ ou vapor),
- Faixa de temperatura de operação;
- Modo de transferência de calor — se o calor para o gaseificador se origina do próprio gaseificador, ou seja, por aquecimento direto ou de um emissor independente, ou seja, aquecimento indireto, incluindo a circulação de uma substância inerte ou vapor (SPEIGHT, 2020) dos gaseificadores com fornecimento de calor ao reator (autotérmico e alotérmico);
- Tipo de pressão (atmosférico ou pressurizado);
- Contato entre o oxidante e o combustível (leito fixo, leito fluidizado e leito arrastado).

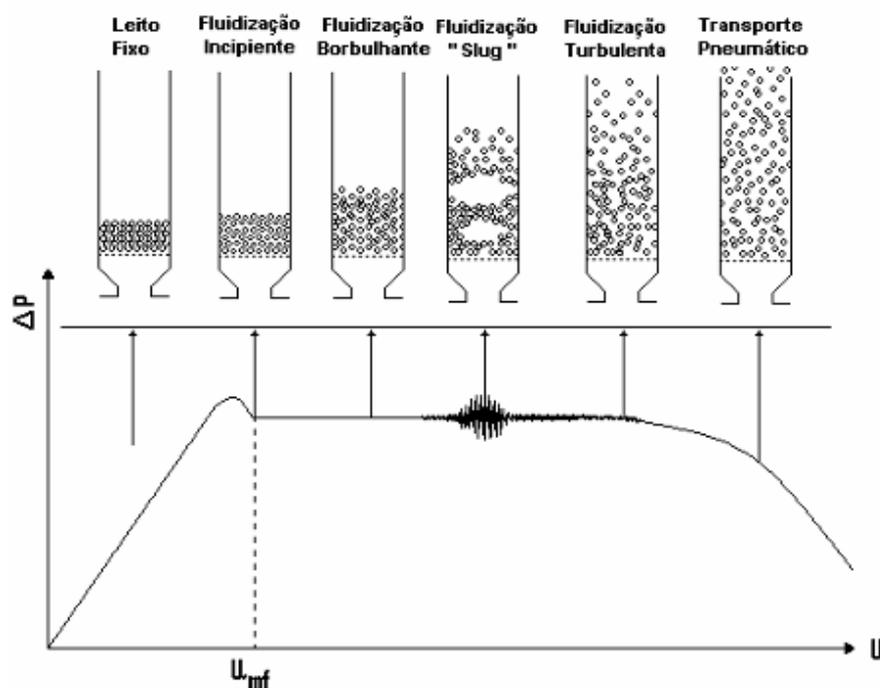
Segundo Cremasco (2014), os leitos fluidizados apresentam partículas suspensas, com material sólido e distantes uma das outras quando submetidas ao escoamento da fase fluida sem sofrer arrasto. A fase particulada, tem comportamento semelhante ao fluido, pois formam interstícios que facilita a passagem do gás entre as partículas, ou seja, o gás quando escoar no

sentido vertical, ascendente onde aplicado a velocidade que sustente o peso de cada partícula, grupo dessas partículas sólidas ocorre o desempenho similar ao gás.

A vazão de alimentação, está estritamente ligada a velocidade terminal da partícula (u_t), para que aconteça, o estado fluidodinâmico da velocidade superficial, seja superior à velocidade superficial de mínima fluidização e inferior da velocidade terminal. Conforme fluxo de alimentação de sólidos aumenta, surge o processo de recirculação interna. Contudo, para baixas velocidades do gás, existira uma concentração maior de partículas sólidas, sendo que a situação de fluxo neste caso representará a região densa do escoamento.

Um reator de leito fluidizado, verifica-se a formação de etapas quando aumenta a vazão do gás ou a velocidade superficial do gás de fluidização em leito de partículas sólidas. Na Figura 2.6, são observados os cinco regimes distintos de contato gás-sólido, a variação da perda de carga do leito e da fração volumétrica de vazios ou porosidade do leito em função da velocidade superficial do gás de fluidização ao longo de toda altura do reator. Assim como, o comportamento que as partículas sólidas presentes no leito quando o fluxo gasoso as perpassa (KUNII E EVENSPIEL, 1991).

Figura 2.6 – Regimes de fluidização em função da velocidade superficial do gás



Fonte: Nitz & Guardani, 2008

Análise do sistema em leito de partículas sólidas, num reator alimentado por um gás com uma certa velocidade superficial, fazendo crescer gradativamente esta velocidade, se produz um aumento progressivo da força de arraste sobre o sólido. Na condição inicial, a velocidade é nula, considera-se apenas a passagem do fluido pelos interstícios da matriz porosa.

Este estágio é chamado de leito fixo. Com o aumento da velocidade superficial do fluido, o espaço entre as partículas aumenta um pouco e algumas começam a vibrar e a mover-se em regiões restritas. A esta etapa denomina-se leito expandido. A expansão com aumento da velocidade mínima fluidização, em relação com a qual, a força que o gás exerce sobre o sólido, se iguala completamente ao peso das partículas do leito. Nesta condição, o regime é denominado de fluidização insipiente ou mínima fluidização (KUNII E LEVENSPIEL, 1991).

À medida que a velocidade superficial do gás aumenta acima da velocidade de mínima fluidização, a perda de pressão ao longo do leito permanece essencialmente constante, à medida que o leito continua a se expandir. Nesta fase, o sistema apresenta um arranjo bifásico: por um lado, uma fase densa (fase de emulsão) constituída por sólidos e gases intersticiais e por outro lado, uma fase diluída constituída por bolhas de ar, presentes em todo o escoamento (fase de bolhas) e não acontece mais a expansão do leito. Portanto, o reator opera em um estado de leito fluidizado borbulhante (GELDART, 1973; KUNII & LEVENSPIEL, 1991).

Em alguns leitos alto e em vasos de diâmetro reduzido, desenvolvem-se "*slugs*", que são coalescências de bolhas de gás menores, em bolhas grandes que têm aproximadamente o diâmetro do leito, que se movem para cima e assim arrastam o sólido consigo. Este estado, é definido como *slugging*. Uma bolha estoura e as partículas suportadas por ela, colapsam e caem até que a próxima bolha o levante novamente, causando um movimento oscilatório do leito.

Com aumento seguinte da velocidade superficial, o arranjo do leito gradativamente muda para um estado turbulento, caracterizado por uma distribuição dispersa de sólidos no leito. O leito, permanece neste regime até atingir a velocidade de transporte, próximo a qual, ocorre um aumento brusco na quantidade de partículas transportada. Com movimento caótico do sólido, muito mais disperso, fazendo com que o leito esvazie ao atingir o regime de transporte pneumático, que é suficiente para arrastar todo o material em direção principal do fluxo do fluido, sendo levado para fora da coluna. Este regime é caracterizado por diversas concentrações de sólidos no fluxo de recirculação.

O comportamento da curva, na região onde a velocidade superficial do gás é maior que a velocidade de transporte das partículas, ou seja, a região entre os regimes de recirculação e transporte pneumático, é fortemente influenciado pelo fluxo de sólidos reinjetados pela base o reator (leito fluidizado circulante). Conseqüentemente, existem discrepâncias entre as várias curvas paramétricas de valores crescentes de velocidade superficial do gás.

2.7.1 Modelos e Divisões Hidrodinâmicas para Reatores de Leito Fluidizado

Os leitos fluidizados, são aplicados em diversas operações e, apesar de seu uso disseminado, existem diversas correlações matemáticas, que descrevem um processo de leito

fluidizado empiricamente. Ainda assim, esses modelos dependem da aplicação, pois não existe um modelo com aplicabilidade universal, devido ao comportamento complexo do escoamento de gás e sólido. Logo, a modelagem hidrodinâmica, é um dos desafios atuais para melhorar a compreensão dos processos em leitos fluidizados gás-sólido, para entender o movimento de duas fases em que, a interface é desconhecida e transitória, e a interação entre elas é compreendida apenas, para um número limitado de condições (YANG, 2003; TAGHIPOUR *et al.* 2005).

Para facilitar na modelagem hidrodinâmica de leito fluidizado, Fluidodinâmica Computacional (CFD), esta técnica apresenta vantagens, que permitem a otimização do projeto e aumento de escala da instalação. Em contrapartida, algumas das correlações teóricas e empíricas necessitam da validação dos seus modelos, parâmetros e modelos por medições experimentais, as quais seus resultados sejam semelhantes. A validação do modelo CFD para sistemas gás-sólido, foi revisada por Graçe e Taghipour (2004).

2.7.2 Leito Fluidizado Borbulhante

O gás entra no leito, a uma velocidade maior do que em um leito fixo, formando bolhas de gás que, alteram completamente o regime de contato gás-sólido associado a um leito fixo; em um leito fluidizado borbulhante, a velocidade do gás, ainda não é alta o suficiente, para ser observada acima da superfície do leito à presença de sólidos, sendo este o regime mais estudado pela teoria da fluidização (GÓMEZ-BAREA & LECKNER, 2010).

A influência que os parâmetros de fluidodinâmica, sobre a transferência de massa entre as fases de bolha e emulsão no leito, aumenta a possibilidade para maximizar a conversão, de reações heterogêneas em leitos fluidizados. Este conhecimento, é importante para estabelecer parâmetros corretos da reação e transporte de massa, e torna-se útil, para a tomada de decisões sobre o desempenho do reator do leito borbulhante. Por isso, o contato ideal tem sido estudado e várias abordagens, têm sido propostas (LEVENSPIEL, 2000; VAN LARE, 1991).

Segundo Melo (2012) apresentou a partir de resultados satisfatórios, modelos estudados para implementar em leitos fluidizados borbulhantes, existindo a necessidade de aprender mais sobre a fluidodinâmica desses leitos. Na Tabela 2.3 com descrição das duas grandes descobertas são muito importantes para o estudo da dinâmica dos fluidos do leito:

Tabela 2.3 – Descrição fluidodinâmica da bolha

Modelos	Configuração da Bolha
Davidson e Harrison (1963), verificaram experimentalmente que, a velocidade de subida da bolha depende do tamanho da bolha, e o comportamento do gás perto da bolha depende apenas da velocidade relativa, entre a bolha ascendente e o gás emulsionado ascendente.	
Rowe e Partridge (1962,1965), através do experimental, observaram que cada bolha individual ascendente de gás carrega atrás dela um rastro de sólidos.	

Fonte: Próprio Autor, 2023

As bolhas de fluido, coalescem e seguem à medida que se movem para cima. Como as bolhas, são geradas aleatoriamente no fundo do leito, e ocasionalmente ocorre aglomeração de bolhas adjacentes, evoluiu um grande número de bolhas na parte superior do leito. As bolhas, podem ser esticadas pela interação com outras bolhas. Elas estão concentradas na região central do leito, devido aos efeitos de parede (perda de carga e redução de velocidade). Portanto, a concentração de sólidos na região central do leito, é menor do que nas paredes do sistema (KUNII & LEVENSPIEL, 1991).

As principais correlações hidrodinâmicas, usadas neste modelo para simular o leito fluidizado borbulhante, estão listadas na Tabela 2.4.

Tabela 2.4 –Parâmetros hidrodinâmicos

Parâmetros	Fórmula	Nº de reação
Velocidade mínima de fluidização	$U_{mf} = \left(\frac{\mu}{\rho_g d_p} \right) \left[\sqrt{(1135,7 + 0,0408Ar)} - 33,7 \right]$	(2.9)
Velocidade emulsão	$\left(\frac{U_e}{U_{mf}} \right)^{0,7} = \left[\left(\frac{1 - \epsilon_e}{1 - \epsilon_{mf}} \right)^3 \left(\frac{\epsilon_{mf}}{\epsilon_e} \right) \right]$	(2.10)
Velocidade da bolha	$u_b = U_o - U_{mf} + 0,711(gd_b)^{1/2}$	(2.11)
Velocidade do sólido na emulsão	$u_{s,e} = \frac{\alpha \delta u_b}{1 - \delta - \alpha \delta}$	(2.12)

Velocidade do gás na emulsão	$u_e = \frac{U_e}{\varepsilon_e} - u_{s,e}$	(2.13)
Diâmetro mínimo da bolha	$d_{bo} = 0,347 \left[\frac{A_r(U_o - U_e)}{n_d} \right]^{0,4}$	(2.14)
Diâmetro máximo da bolha	$d_{bm} = 0,652[A_r(U_o - U_e)]^{0,4}$	(2.15)
Diâmetro da bolha	$d_b = d_{bm} - (d_{bm} - d_{bo})e^{-0,3\left(\frac{H}{d_r}\right)}$	(2.16)
Porosidade na bolha	$\varepsilon_b = 1 - 0,466 \exp\left(-\frac{U_o - U_{mf}}{4,439}\right)$	(2.17)
Porosidade na emulsão	$\varepsilon_e = \varepsilon_{mf} + 2 - 0,059 \exp\left(-\frac{U_o - U_{mf}}{4,429}\right)$	(2.18)
Porosidade média	$\varepsilon = \delta \varepsilon_b + (1 - \delta) \varepsilon_e$	(2.19)
Fração de bolhas	$\delta = 0,466 + 0,533 \left[1 - \exp\left(-\frac{U_o - U_{mf}}{4,413}\right) \right]$	(3.20)
Coefficiente de transferência de massa bolha-nuvem	$K_{bc,i} = 4,5 \left(\frac{U_{mf}}{d_b} \right) + 5,85 \left(\frac{D_i^{0,5} g^{0,25}}{d_b^{1,25}} \right)$	(2.21)
Coefficiente de transferência de massa nuvem-emulsão	$K_{ce,i} = 6,78 \left(\frac{\varepsilon_e D_i u_b}{d_b^3} \right)^{0,5}$	(2.22)
Coefficiente de transferência de massa (gás) bolha-emulsão	$\frac{1}{K_{be,i}} = \frac{1}{K_{bc,i}} + \frac{1}{K_{ce,i}}$	(2.23)
Coefficiente de transferência de massa (sólido) rastro-emulsão	$K_{we} = \frac{3(1 - \varepsilon_e) u_e}{(1 - \delta) \varepsilon_e d_b}$	(2.24)
Coefficiente de troca térmica bolha-nuvem	$H_{bc,i} = 4,5 \frac{U_{mf} \rho_g C_{pg}}{d_b} + 5,85 \frac{(k_g \rho_g C_{pg})^{0,5} g^{0,25}}{d_b^{1,25}}$	(2.25)
Coefficiente de troca térmica nuvem- emulsão	$H_{ce,i} = 6,78 \left(\frac{\varepsilon_e k_g \rho_g C_{pg} u_b}{d_b^3} \right)^{0,5}$	(2.26)
Coefficiente de troca térmica bolha- emulsão	$\frac{1}{H_{be,i}} = \frac{1}{H_{bc,i}} + \frac{1}{H_{ce,i}}$	(2.27)
Coefficiente convectivo de calor para o sólido	$\frac{h_p d_p}{k_g} = 2 + 0,6 Re^{1/2} Pr^{1/3}$	(2.28)

Fonte: Adaptado de Melo, 2012

A desvantagem do leito fluidizados borbulhante, que em virtude ao alto grau de mistura entre as partículas sólidas e parcialmente gasosas, devido ao curto período de retenção dentro do reator, pode haver partículas que, saem do leito ainda carregando carbono não convertido. A mesma forma, que a lenta difusão do oxigênio das bolhas na área densa, é algo para ter em mente durante a escolha da aplicação do leito. Como consequência, na fase gasosa, as reações de oxidação, são predominantes sobre as de redução, diminuindo a eficiência do processo (MCKENDRY, 2002).

2.7.3 Leito Fluidizado Borbulhante com *Slug*

O aumento da velocidade do leito, acontece a coalescência das bolhas, são grandes bolhas se formam no meio do leito, com diâmetro superior a um terço do diâmetro do reator.

Esse fenômeno, denominado *slugging* e pode ser considerado como um regime de transição entre borbulhante e turbulento. Bolhas grandes têm alta energia e, quando estouram, com o impacto na parede do reator ou na superfície do leito, expeliram uma grande quantidade de energia, ocasionando mais turbulência no leito.

Vários mecanismos, são relatados na literatura para a coalescência de bolhas Clift & Grace (1985) explicam que, assumindo duas bolhas centradas em uma linha vertical comum, sobem verticalmente, a bolha inferior acelera sob a influência do líder, de modo que, a coalescência ocorre quando a bolha inferior se aproxima. Para bolhas não alinhadas verticalmente, Toei *et al.*, (1967) relata que a bolha inferior, se move em direção à linha de ascensão da superior, posteriormente acelerando verticalmente para entrar em sua esteira, de modo, a coalescência ocorre tipicamente com o alinhamento da bolha quase vertical. No entanto, Cranfield e Geldart (1974) explicam que, “a coalescência em leitos do grupo D é muito menos compreendida: qualitativamente, as bolhas parecem crescer absorvendo gás das bolhas vizinhas, e não como resultado do movimento relativo das bolhas”.

Em relação aos parâmetros hidrodinâmicos, usados no leito borbulhante, presentes na Tabela 2.4, três parâmetros se tornam importantes para definir a região de *slugging*: velocidade da bolha, coeficiente de transferência de massa bolha/emulsão e coeficiente de troca térmica bolha/emulsão. Esses três parâmetros são calculados no modelo, para esta região, através das correlações mostradas na Tabela 2.5.

Tabela 2.5 –Parâmetros hidrodinâmicos para o *slugging* no leito

Parâmetros	Fórmula	Nº de reação
Velocidade da bolha	$u_b = U_o - U_{mf} + 0.35(gd_b)^{1/2}$	(2.29)
Parâmetros dos coeficientes de troca mássica e térmica	$m = \frac{H - L_s}{D_r} - 0,495 \left(\frac{H - L_s}{D_r} \right) + 0,061$ $I = 0,379 \left(\frac{H - L_s}{D_r} \right)^{0,8625}$	(2.30)
Coeficiente de transferência de massa bolha-nuvem	$K_{bcs,i} = \frac{1}{D_r m} \left(U_{mf} + \frac{16 \varepsilon_{mf} I}{1 + \varepsilon_{mf}} \left(\frac{D_i}{\pi} \right)^{0,5} \left(\frac{g}{D_r} \right)^{0,25} \right)$	(2.31)
Coeficiente de transferência de massa nuvem-emulsão	$K_{ces} = \frac{1 - \delta}{D_r \delta} (0,35 \varepsilon_e (g D_r)^{0,5} - U_{mf})$	(2.32)
Coeficiente de transferência de massa (gás) bolha-emulsão	$\frac{1}{K_{bes,i}} = \frac{1}{K_{bcs,i}} + \frac{1}{K_{ces}}$	(2.33)

$$H_{bcs,i} = \frac{1}{D_r m} \left(U_{mf} \rho_g C_{pg} + \frac{16 \varepsilon_{mf} l}{1 + \varepsilon_{mf}} \left(\frac{k_g \rho_g C_{pg}}{\pi} \right)^{0.5} \left(\frac{g}{D_r} \right)^{0.5} \right) \quad (2.34)$$

Coefficiente de troca térmica bolha-nuvem

$$H_{ces,i} = \frac{1 - \delta}{D_r \delta} (0,35 \varepsilon_e (g D_r)^{0.5} - U_{mf}) \rho_g C_{pg} \quad (2.35)$$

Coefficiente de troca térmica nuvem-emulsão

$$\frac{1}{H_{bes,i}} = \frac{1}{H_{bcs,i}} + \frac{1}{H_{ces,i}} \quad (2.36)$$

Coefficiente de troca térmica bolha-emulsão

Fonte: Adaptado de Melo, 2012

2.7.4 Leito Fluidizado Circulante

O estudo sobre leito fluidizado rápido, também é conhecido como circulante, foi iniciado por Yerushalmi *et al.*, (1976) e definido como, a transição entre o regime turbulento e o transporte pneumático. Nesses regimes de contato, os sólidos são retirados do leito e devem ser substituídos ou recirculados. Por isso temos, leitos fluidizados circulantes (LFC) em operação contínua (LEVENSPIEL, 2000).

Segundo Basu (2006) em um leito fluidizado rápido ou circulante, há uma alta velocidade relativa entre o gás e os sólidos, onde o gás flui acima da velocidade terminal das partículas. A quantidade líquida de sólidos descarregada da coluna de fluidização ou *riser*, passa pelos outros componentes do sistema e forma um circuito. Nas câmaras de combustão LFC, a alta taxa de recirculação dos sólidos garante a uniformidade da temperatura do leito (PECORA, 1995; MORITA, 2009).

Neste regime fluidodinâmico, a coluna de fluidização estará parcialmente carregada com sólidos, que devem ser devolvidos a ela para manter a condição de estabilidade operacional. A linha que demarca o limite entre os regimes turbulento e rápido, corresponde às velocidades de colapso do leito (*choking*), nas quais há uma mudança brusca no valor da queda de pressão entre dois pontos verticais da coluna do *riser*.

As altas velocidades do gás, no sistema de fluidização rápida, o leito passa a ocupar todo o volume da coluna fluidização, o que permite determinar uma diminuição gradativa da densidade da suspensão gás-sólido, ao longo da extensão vertical do reservatório (THOBER, 1995). A natureza das partículas, está relacionada com a forma da distribuição de densidade axial do leito, havendo uma diminuição gradual das partículas finas e uma diminuição brusca das partículas grossas (PECORA, 1995).

A concentração de sólidos, mudará não apenas com a distância axial ao longo da coluna de fluidização, mas também com a direção radial. A movimentação dos sólidos, ocorre em duas zonas dentro do leito, uma no centro e outra anular próximo à parede da torre. Na região central,

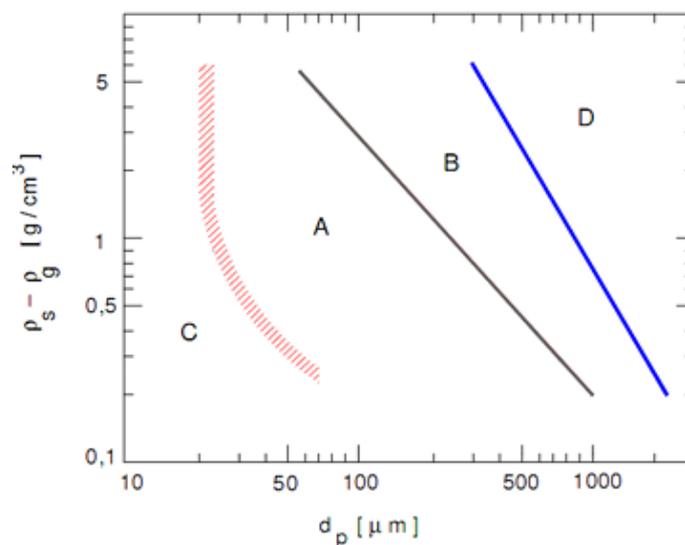
os sólidos se movem principalmente para cima, alguns se espalhando radialmente, formando aglomerados ou *clusters* ao longo das paredes. Na região anular, esses aglomerados tendem a retornar ao fundo da coluna a uma taxa relativamente baixa e, quando o fluxo de gás dissipa os aglomerados, as partículas retornam ao centro da coluna.

Na literatura, vários modelos têm sido usados para descrever o leito fluidizado circulante, incluindo o modelo de reator de pistão, o modelo de mistura, o modelo de vaso em cascata, o modelo de pistão axialmente disperso e modelos baseados na teoria de duas fases. O problema de avaliar, empiricamente determinados parâmetros, limita a seleção dos modelos mais adequados. Diversos trabalhos publicados, geralmente apenas enquadram num conjunto de dados empíricos, muitas vezes ineficazes na hora de extrapolar ou descontar medidas (ROSAL, 2008; SANT'ANNA, 2015).

2.7.5 Classificação das Partículas

No processo de fluidização, é largamente influenciada pelas características das partículas para interesse industrial. A demanda para produzir com as características gerais do material particulado, são classificadas de acordo com suas propriedades físicas. Desse modo, Geldart (1973) foi o primeiro a criar um sistema de classificação. Em sua classificação, foram reconhecidos quatro grupos (de A a D), cada um exibindo um comportamento diferente, quando fluidizado. Os grupos, são caracterizados pelas massas específicas das partículas e do agente fluidizador, assim como pelo diâmetro médio das partículas (YANG, 2003). A Figura 2.7, mostra o diagrama de classificação de partículas de Geldart, para cada um dos grupos de partículas.

Figura 2.7 – Diagrama da classificação de Geldart (fluido: ar; T: 25°C; p: 1 atm).



Fonte: Adaptado de Kunii & Levenspiel, 1991

- O grupo A, inclui partículas pequenas com diâmetro médio entre 30–150 μm e baixa densidade ($\rho < 1,4 \text{ g/cm}^3$). Após fluidização mínima e antes do início da formação de borbulhamento, o leito de partículas exibe expansão homogênea. Possibilita operar com baixas vazões de gás, controlar o crescimento e velocidade das bolhas. Como exemplo, pode-se citar as partículas que operam um reator FCC (*Fluid Catalytic Cracking*) na indústria do petróleo
- O grupo B, inclui materiais com partículas de diâmetro médio (100–1000 μm) e densidade entre 1,4 e 4 g/cm^3 , como areia do mar ou do rio. As bolhas, aparecem logo acima da velocidade mínima do leito fluidizado, ou seja, as bolhas tendem a crescer muito e surgem no início da fluidização ($u_{mf} \approx u_{mb}$). A velocidade ascendente das bolhas, é maior do que a velocidade do gás que se move entre os interstícios.
- As partículas do Grupo C, são partículas muito finas ($d < 30 \mu\text{m}$). A fluidização é difícil. As camadas formadas por este tipo de partículas, tendem a formar canais que comprometem o regime de fluidização. Exemplificando esse grupo, temos os fármacos nanoparticulados, a farinha de trigo e o cimento.
- O grupo D, com partículas densas e grandes ($d > 1000 \mu\text{m}$). Uma característica importante deste grupo, é que as bolhas ascendem a uma taxa menor no leito, que aquela do gás nos interstícios das partículas. Isto também acontece, nas partículas do tipo B, o leito também muda de sólido para borbulhante, acima da velocidade mínima de fluidização. Como exemplos, é possível citar os grãos em geral, como o café, milho e a soja.

Yang (2003) e Gogolek & Grace (1995) apresentam diferentes formas de definir limites entre um grupo de partículas e outros. Partículas dos tipos A, B e D são utilizadas em leitos fluidizados.

2.8 MODELAGEM MULTIFÁSICA

Existem, duas abordagens para descrever e quantificar os fenômenos, que ocorrem em sistemas multifásicos: abordagem de Euler-Euler ou a abordagem de Euler-Lagrange. A abordagem euleriana, estuda a fase dispersa como uma fase contínua subdividida em duas categorias: modelo de um fluido, onde um único conjunto de equações de conservação são resolvidas para as duas fases (dispersa e contínua); em um modelo de dois fluidos, cada fase tem sua forma de equação de conservação. Excepcionalmente, a abordagem lagrangiana,

assume que a fase dispersa, consiste em partículas fluindo ao longo do domínio (DAL'TOÉ, 2014).

A escolha da técnica de modelagem multifásica, depende do nível de detalhamento requerido e das propriedades do sistema de interesse. Boemer *et al.* (1997) afirmaram que, a abordagem de Euler-Euler com a Teoria Cinética (KTGF) descreve os processos em leitos fluidizados, de acordo com dados experimentais.

2.8.1 Abordagem Euler-Euler

O método de Euler-Euler (EE) é utilizado nos estudos da fluidização. Duas fases (neste caso, uma fase líquida e uma fase gasosa) são consideradas matematicamente como contínuos interpenetrantes. Múltiplas equações diferenciais parciais (EDPs), como equações de continuidade, equações de Navier-Stokes e equações de modelo de turbulência, são adicionadas para cada fase. Uma das desvantagens dessa abordagem, é a falta de informação sobre o comportamento das bolhas individuais. Requer aproximações e, portanto, fornece apenas parâmetros para um determinado processo calculado sobre a unidade computacional. Uma extensão da abordagem clássica de EE, é a implementação da equação de balanço populacional (EPB), com grãos coalescentes e quebrados. Isso nos permite, prever a distribuição do tamanho das bolhas e sua variação dentro dos sistemas modelados, como vasos agitados, colunas, etc. (KRÝSA & ŠOÓŠ, 2022).

Para a solução da fórmula de Euler, uma das propriedades das partículas que precisa ser determinada é a viscosidade, que é obtida por KTGF (*Kinetic Theory of Granular Flows*). Essa formulação, é válida para leitos fluidizados onde, o valor da fração volumétrica da fase granular, supera o limite recomendado no método Euleriano-Lagrangiano. O método de Euler usa KTGF, transcrito mais amplamente utilizado para estudos de fluxo gás-sólido (LU *et al.*, 2018a; QIN & WANG, 2019; WU *et al.*, 2020; WANG, 2022). Gidaspow (1994) desenvolveu como o padrão para representação de leito fluidizado. A maior vantagem de usar a abordagem de Euler, o custo computacional, sendo menor que na abordagem lagrangiana, portanto é mais utilizada em simulação numérica de leitos fluidizados.

Abordagem Euler-Euler, pode ser aplicado a escoamentos multifásicos contendo grandes frações volumétricas na fase dispersa. Devido, à natureza discreta do processo subjacente, esta abordagem requer um extenso esforço de modelagem para fornecer, um modelo envolvendo o contínuo associado às partículas da fase dispersa. Embora, algumas das correlações usadas no modelo, ainda sejam empíricas ou semiempíricas (KHODABANDEHLOU & ASKARIPOUR, 2021).

2.8.2 Equações de Conservação

As equações de conservação utilizadas na mecânica dos fluidos, são aplicadas sempre a partículas fluidas. Estas podem ser definidas como uma pequena massa de fluido de volume infinitesimal onde as propriedades do fluido são consideradas constantes (CHAUHAN *et al.* 2022).

2.8.2.1 Conservação de Massa

Na abordagem euleriana, as equações governantes para fase gasosa e fase sólida são descritas a seguir:

- Fase gasosa:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g) + \nabla(\alpha_g \rho_g \vec{v}_g) = 0 \quad (2.37)$$

- Fase sólida:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s) + \nabla(\alpha_s \rho_s \vec{v}_s) = 0 \quad (2.38)$$

Onde os subscritos g e s indicam que o termo é aplicado para fase gasosa e particulada, respectivamente. A variável t representa o tempo, α a fração volumétrica, ρ a massa específica, \vec{v} o vetor velocidade.

2.8.2.2 Conservação de Momento

A equação da conservação de momento para as fases gasosa e sólida é dada por:

- Fase gasosa:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g \vec{v}_g) + \nabla(\alpha_g \rho_g \vec{v}_g \vec{v}_g) = -\alpha_g \nabla p + \nabla \underline{\tau}_g + \alpha_g \rho_g \vec{g} + K_{gs}(\vec{v}_g - \vec{v}_s) \quad (2.39)$$

- Fase sólida:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \vec{v}_s) + \nabla(\alpha_s \rho_s \vec{v}_s \vec{v}_s) = -\alpha_s \nabla p - \nabla p_g + \nabla \underline{\tau}_s + \alpha_s \rho_s \vec{g} + K_{gs}(\vec{v}_g - \vec{v}_s) \quad (2.40)$$

Onde p é a pressão estática e $\underline{\tau}_g$ é o tensor tensão para a fase gasosa. A força do campo gravitacional é representada por $\rho_g \vec{g}$, sendo \vec{g} aceleração da gravidade. Na equação para a fase sólida p_g é a pressão dos sólidos determinado pela Teoria Cinética de Escoamento Granular. A variável K_{gs} é o coeficiente de interação entre as fases.

2.8.2.3 Tensor Tensão

Os modelos para o tensor tensão para as fases gasosa e sólida é dado por:

- Fase gasosa:

$$\bar{\tau}_g = \alpha_g \mu_g (\nabla \vec{v}_g + \nabla \vec{v}_g^T) + \alpha_g \left(\lambda_g - \frac{2}{3} \mu_g \right) \nabla \cdot \vec{v}_g \bar{I} \quad (5)$$

- Fase sólida:

$$\bar{\tau}_s = \alpha_s \mu_s (\nabla \vec{v}_s + \nabla \vec{v}_s^T) + \alpha_s \left(\lambda_s - \frac{2}{3} \mu_s \right) \nabla \cdot \vec{v}_s \bar{I} \quad (6)$$

Sendo μ_g e λ_g a viscosidade cisalhante e a viscosidade global da fase gasosa. O segundo termo do lado direito da equação representa o efeito da dilatação do volume sendo o tensor unitário. As variáveis μ_s e λ_s são a viscosidade cisalhante e a viscosidade global da fase particulada determinadas pela Teoria Cinética de Escoamento Granular.

2.8.3 Modelo Turbulência κ - ε

A dinâmica dos fluidos turbulentos, está fisicamente relacionada com a dispersão de gases, ruptura/coalescência de bolhas e fenômenos de transferência de interfase. O profundo conhecimento da turbulência em colunas de bolhas, é crucial para o sucesso do projeto e aumento de escala do reator.

A turbulência multifásica, pode ser descrita pelos métodos de Simulação Numérica Direta (SND) totalmente resolvidos. Devido à enorme demanda computacional, a aplicação de métodos baseados em SND é restrita apenas a poucas bolhas em sistemas gás-líquido. Alternativamente, o modelo de dois fluidos de Euler-Euler, é amplamente empregado para simular os fluxos turbulentos gás-líquido, com altas frações de gás. Contudo, abordagem de modelagem de dois fluidos gás-líquido, ainda permanece com algumas questões em aberto, devido à incerteza sobre os termos de interação de fase, esquemas de fechamento de turbulência e tamanhos de bolhas múltiplas (TRYGGVASON *et al.*, 2011; LIU *et al.*, 2014).

O modelo de turbulência da equação $k - \varepsilon$, é amplamente aplicado na simulação de escoamentos turbulentos borbulhantes. Esse modelo, possui simplicidade matemática e requer baixa demanda computacional. No entanto, não sendo aconselhável para escoamentos rotacionais com alto grau de anisotropia do tensor de Reynolds, o que se adéqua à agitação lenta. É um modelo, utiliza duas equações diferenciais de transporte de propriedades turbulentas, configurando-se assim como um modelo de fechamento completo (SANT'ANNA *et al.*, 2015).

O modelo $k - \varepsilon$, tem a vantagem de ser um modelo simples que requer apenas condições iniciais e de contorno para aplicação. Possui excelente desempenho na maioria dos processos relevantes da indústria, além disso, é o modelo mais eficaz com dados experimentais e industriais. Os valores estimados para $k - \varepsilon$, na entrada do domínio, fornecem campos corretos

no interior do domínio. Isto porque, sua influência diminui à medida que o escoamento avança no domínio, além disto, $k - \varepsilon$ são produzidos e destruídos no interior do domínio. Estas fontes, estabelecem os valores corretos dos balanços de $k - \varepsilon$, diminuindo a relevância dos valores de entrada (ULLAH *et al.*, 2020).

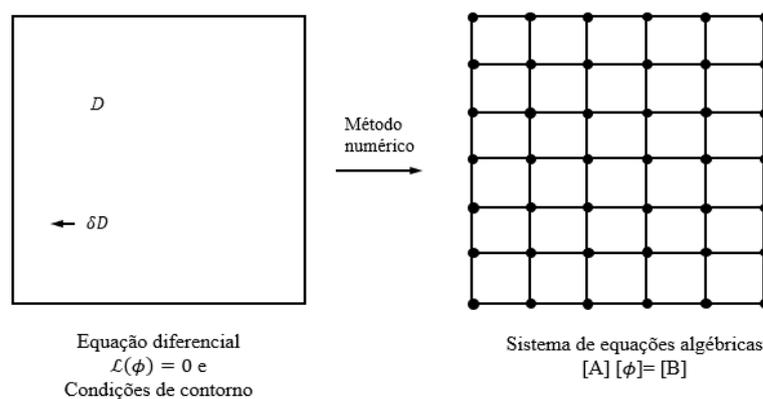
A energia cinética turbulenta e a taxa de dissipação turbulenta de fluxos multifásicos, podem ser calculadas com três modelos de turbulência κ - ε diferentes: mistura, dispersão e por fase. O modelo de turbulência κ - ε disperso, é apropriado quando, a concentração de sólidos no escoamento multifásico é diluída. Nesse caso, as colisões entre as partículas são desprezíveis e o fluxo turbulento da fase partícula é dominado pelo movimento aleatório da fase gasosa (FAÍSCA, 2013; SANT'ANNA *et al.*, 2015).

2.9 MÉTODOS NUMÉRICOS

A finalidade de um método numérico, é resolver uma ou mais equações diferenciais, substituindo as derivadas existentes, por expressões algébricas envolvendo funções desconhecidas. Quando não há possibilidade de solução analítica, pode-se fazer aproximação numérica na equação diferencial, sendo encontrado a solução para um número de pontos tem certo erro, quanto mais pontos, mais próximo o resultado numérico está da solução exata.

Figura 2.8, exemplifica o objetivo do método numérico, onde uma equação diferencial escrita no nível infinitesimal e definida para o domínio D , é transformada em um sistema de equações algébricas. Para isso, é necessário substituir as derivadas das funções já presentes na equação diferencial, por valores discretos da função. Transformar derivadas em termos envolvendo funções, implica integrar funções diferenciais, e as diferentes formas de obtenção dessas equações algébricas, caracteriza o tipo do método numérico (MALISKA, 2014).

Figura 2.8 – Função do método numérico



Fonte: Adaptado de Maliska, 2014

Os métodos utilizados na solução numérica do problema são, Métodos de Diferenças Finitas (MDF), Métodos de Volumes Finitos (MVF) e Métodos de Elementos Finitos (MEF). O método numérico mais usado em *software* CFD comercial (incluindo FLUENT) é o MVF devido à sua robustez.

O método dos volumes finitos (MVF) de aproximação de equações, visa facilitar a discretização do domínio de interesse, ou seja, sua divisão em unidades elementares. Apesar de não ser obrigatório, é comum em MVF utilizar a discretização estruturada (construída usando um sistema coordenado), através de coordenadas ortogonais, cartesianas, cilíndricas, esféricas para o caso bidimensional (MALISKA, 2014).

Hirt & Nichols (1981) propuseram o modelo MVF, que utiliza o método de Euler-Euler para definir escoamentos com interfaces bem definidas (fases separadas). Neste modelo, dois ou mais fluidos são considerados imiscíveis. Como o volume de uma fase, não pode ser ocupado por outras fases, utiliza-se o conceito da fração volumétrica. Supõe-se, que estas frações de volume são funções contínuas do espaço e o tempo e suas somas são iguais a um.

Os esquemas de interpolação disponíveis no FLUENT são: *Upwind*, *Power Law* e *QUICK*. O método *QUICK* para fração volumétrica, baseia-se na média ponderada do *Second Order Upwind* e da interpolação central de uma variável. Esse método é mais preciso em malhas estruturadas alinhadas com o fluxo (SANT'ANNA *et al.*, 2015).

2.10 CINÉTICA QUÍMICA

O processo de gaseificação, realizado em quatro etapas, que são secagem, pirólise, gaseificação e combustão parcial. As únicas mudanças relacionadas à temperatura, são a secagem, pirólise primária e alguma pirólise secundária. As mudanças químicas, acontecem na gaseificação, combustão parcial e alguma pirólise secundária por meio de reações químicas, que podem ocorrer entre gases, chamadas de reações homogêneas, ou entre gás e sólido, chamadas de reações heterogêneas.

Neste caso, uma modelagem completa dos fenômenos de conversão de combustíveis sólidos em leito fluidizado, requer não apenas o estudo da termo fluidodinâmica multifásicos, mas também, uma descrição detalhada de cada processo de conversão que ocorre. De fato, nos modelos de leito fluidizado (tópico 2.6) e nos modelos de fluidodinâmica computacional (tópico 2.10), os termos fonte, aparecem nas equações de conservação devido às interações das espécies químicas presentes no reator. Esses termos fonte, são determinados pela cinética química do processo de gaseificação, que tende a descrever cada etapa termoquímica da evolução do processo.

2.10.1 Reações Químicas

As reações químicas, durante o processo de gaseificação, podem ser homogêneas ou heterogêneas, e sua modelagem requer uma descrição da estequiometria e da velocidade de reação. Usando estequiometria e taxas de reação, os termos nas equações de conservação podem ser calculados.

Monteiro *et al.* (2017), Kumar (2020) e Maya *et al.* (2021) descreve as reações químicas mais importantes durante o processo de gaseificação de forma simplificada. As reações mencionadas são mostradas na Tabela 2.6. A modelagem é expressa a seguir, cada reação química envolvida no processo de gaseificação, utilizando uma representação mais detalhada da estequiometria das reações heterogêneas e utilizando uma numeração específica para cada espécie química.

Tabela 2.6 - Principais reações químicas no processo de gaseificação

Reação Química	Nº da reação
<i>Reações heterogêneas</i>	
Oxidação do carbono:	
$C + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO$	(2.43)
$C + O_2 \rightarrow CO_2$	
Reação de Boudouard:	
$C + CO_2 \rightarrow 2CO$	(2.44)
Reação de gás d'água:	
$C + H_2O \rightarrow CO + H_2$	(2.45)
Formação do metano:	
$C + 2H_2 \rightarrow CH_4$	(2.46)
<i>Reações homogêneas</i>	
$CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2$	(2.47)
$CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2$	(2.48)
$1/3 (CO+H_2+CH_4) + O_2 \rightarrow 2/3CO_2 + H_2O$	(2.49)

Fonte: Próprio Autor, 2023

2.10.2 Reações Químicas Homogêneas e Heterogêneas

Todas as cinéticas de reação homogênea (Tabela 2.7) implementadas no modelo CFD, resultaram na previsão significativa da temperatura dentro da zona de oxidação do gaseificador, devido à natureza exotérmica dessas reações. Em geral, uma reação química é uma combinação complexa de várias reações elementares, cuja sequência é conhecida como mecanismo em cadeia, envolvendo várias espécies químicas estáveis e instáveis. As Eqs. (2.50) - (2.60)

mostram as fórmulas usadas para o cálculo das taxas de reação e dos coeficientes cinéticos das reações.

Nas reações heterogênea, a resistência à transferência de massa é maior do que nas reações homogêneas. Existem vários modelos de partículas que podem ser usadas para aproximar a taxa de uma reação heterogênea.

Tabela 2.7 – Cinéticas usadas no modelo do processo de gaseificação

Reação química	Taxa de reação	Nº da reação
<i>Reações Heterogêneas</i>		
$C + (\lambda+2)/2(\lambda+1)O_2 \rightarrow$ $(\lambda/(\lambda+1))CO +$ $(1/(\lambda+1))CO_2$	$R_1 = 1,5 \times 10^6 \exp \exp \left(-\frac{13078}{T} \right) P_{O_2} (1 - X_c)^{1.2} C_c \text{ kmol}$ $/m^3s$	(2.50)
$C + H_2O \rightarrow CO + H_2$	$\lambda = 3 \times 10^8 \exp \left(-\frac{30178}{T} \right)$ $R_2 = 2,07 \times 10^7 \exp \left(-\frac{220000}{RT} \right) P_{H_2O}^{0.73}$	(2.51)
$C + CO_2 \rightarrow 2CO$	$R_3 = 1,12 \times 10^8 \exp \left(-\frac{245000}{RT} \right) P_{CO_2}^{0.31}$	(2.52)
$C + 2H_2 \rightarrow CH_4$	$R_4 = R_{14} \left(\frac{C_{H_2}}{C_{H_2O}} \right) \text{ kmol}/m^3s$	(2.53)
<i>Reações Homogêneas</i>		
$CO + H_2O \rightarrow$ $CO_2 + H_2$	$R_8 = 2,78 \times 10^3 \exp \left(-\frac{1210}{T} \right) \left[C_{CO} C_{H_2O} \right.$ $\left. - \frac{C_{CO_2} C_{H_2}}{0,0265 \exp \left(\frac{3968}{T} \right)} \right] \text{ kmol}/m^3s$	(2.54)
$CH_4 + H_2O \rightarrow$ $3H_2 + CO$	$R_9 = 3,3 \times 10^{10} \exp \left(-\frac{240 \times 10^3}{RT} \right) C_{CH_4}^{1.7} C_{H_2}^{-0.8} \text{ mol}/m^3s$	(2.55)
$2CO + O_2 \rightarrow 2CO_2$	$R_{10} = 4,5 \times 10^{11} \exp \left(-\frac{19607}{T} \right) C_{O_2}^{0.25} C_{CO} C_{H_2O}^{0.5} \text{ mol}/cm^3s$	(2.56)
$CH_4 + 2O_2 \rightarrow$ $CO_2 + 2H_2O$	$R_{11} = 1,58 \times 10^{13} \exp \left(-\frac{24343}{T} \right) C_{CH_4}^{0.7} C_{O_2}^{0.8} \text{ mol}/cm^3s$	(2.57)
$2H_2 + O_2 \rightarrow$ $2H_2O$	$R_{12} = 2,196 \times 10^{12} \exp \left(-\frac{13127}{T} \right) C_{H_2} C_{O_2} \text{ mol}/cm^3s$	(2.58)
$C_6H_6O + 4O_2 \rightarrow 3H_2O +$ $6CO$	$R_5 = 0,655 \times 10^3 T \exp \left(-\frac{9650}{T} \right) C_{C_6H_6O}^{0.5} C_{O_2} \text{ mol}/m^3s$	(2.59)
Alcatrão $\rightarrow 0.0173H_2 +$ $0.563CO + 0.0884CH_4 +$ $0.1109CO_2 +$ $0.22Alcatrão_{inerte}$	$R_5 = 10^{4,98} T \exp \left(-\frac{93370}{RT} \right) C_{C_6H_6O} \text{ kmol}/m^3s$	(2.60)

Fonte: Adaptado de Radmanesh, 2006

2.11 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD)

A Fluidodinâmica Computacional (*Computational fluid dynamics* - CFD) é designação de um grupo de técnicas matemáticas, numéricas e computacionais usadas para resolver, verificar e interpretar soluções para equações de conservação (como massa, momento e energia) de quantidades físicas de interesse. A ferramenta CFD, muito utilizada para analisar o comportamento do reator de leito fluidizado, mas a modelagem ainda apresenta instabilidades numéricas nas equações, e a interface gás-sólido é transitória e conhecida apenas em algumas regiões (TAGHIPUOR *et al.* 2005; PHILIPPSEN *et al.*, 2015).

A primeira disseminação desta tecnologia, pode ser atribuída à indústria aeroespacial na década de 1960, quando começou a utilizar a simulação com auxílio do CFD. Em um curto período de tempo, o CFD começou a ser estudado e aplicados em diversas situações físicas. Atualmente, resolver problemas de engenharia usando simulação numérica com técnicas de CFD, tornou-se muito popular tanto na academia quanto na indústria. O grande número de publicações científicas e a disponibilidade de *software* livre ou comercial, ajudaram a disseminar e expandir a base de conhecimento da fluidodinâmica computacional (MALISKA, 2014).

Quando aplicada para gaseificadores, o sistema a ser resolvido, necessário para dispor das condições iniciais e de contorno do problema. As equações da ferramenta do CFD, podem ser definidas em uma matriz de elementos CFD, que leva em consideração os fluxos de entrada e saída das quantidades mencionadas e com domínio de controle para as condições de contorno apropriadas. O *software* CFD, foi usado para estudar todas as modificações e reações do processo de gaseificação, incluindo evaporação, pirólise (evaporação) e reações de gaseificação de partículas de biomassa (BABU & CHAURASIA, 2004). Por exemplo, no caso de um fluido newtoniano incompressível em um tubo cilíndrico, as condições iniciais são os campos de velocidade e pressão dentro do tubo no tempo 0 s, enquanto as condições de contorno são os valores na entrada, saída e nas imediações das paredes do tubo (CAMPOS, 2020; KUSHWAH *et al.*, 2022).

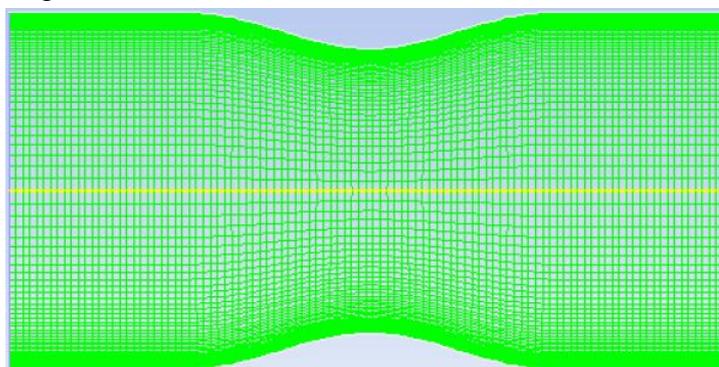
Existem alguns *softwares* de CFD comercial, como Star CCM, Phoenics e ANSYS FLUENT, pode ser usado para modelar a gaseificação. Por outro lado, a modelagem CFD da gaseificação de biomassa, requer uma melhor compreensão do processo. Além disso, diferentes dinâmicas químicas foram usadas para as mesmas operações, levando a ambiguidades e diferenças nos resultados. O processo de formação de alcatrão ao longo do gaseificador, por outro lado, não foi devidamente investigado pelo trabalho de modelagem CFD, por isso precisa de mais análises e pesquisas. Os modelos de CFD, podem incluir uma variedade de variáveis operacionais e de projeto, e o efeito na qualidade do gás de síntese pode ser mais investigado.

Devido à falta de amplo poder de computacional e anisotropia de biomassa (PATRA & SHETH, 2015), simulações abrangentes de CFD para gaseificação de biomassa são raras.

A simulação em CFD, pode ser dividida em 3 etapas principais: pré-processamento, solução e pós-processamento. Na primeira etapa, construção da geometria do problema usando *software* de modelagem 2D e 3D e depois dividida em volume, usando algoritmos geradores de malha comumente encontrados em programas de modelagem. Neste ponto, são nomeados os volumes nas áreas da geometria, onde será a superfície no escoamento do fluido e quais serão tratadas como paredes ou objetos sólidos. É importante observar, os fatores como precisão e tempo de simulação estão diretamente relacionados ao tamanho da malha, também chamada de células, mantendo o cuidado para especificar regiões críticas da geometria.

As células da malha, podem possuir qualquer forma geométrica, desde que compatível com o programa utilizado na etapa de solução. Normalmente, as células hexaédricas fornecem melhor tempo e convergência na solução dos problemas, apesar disso exigem mais trabalho computacional para serem produzidas em comparação com os elementos tetraédricos. Para exemplificar a Figura 2.9, mostra a geometria de uma tubeira, mas apresenta toda discretizada em volumes finitos.

Figura 2.9 – Geometria discretizada malha da tubeira 2D



Fonte: Ansys, 2009

Uma vez que a malha e as condições iniciais e de contorno do problema estejam prontas, segue para etapa de solução. Existem atualmente, várias ferramentas comerciais e de código aberto para problemas multifásicos que suportam aplicações CFD, e essas ferramentas quase sempre fornecem mais de um algoritmo de solução. Esta etapa, também seleciona o passo de tempo (se aplicável), juntamente com os esquemas numéricos a serem utilizados, sendo ambos fatores importantes para a estabilidade e convergência do problema. A visualização desses resultados, necessitam de programas de pós-processamento apropriados para interpretá-los e renderizá-los, além de fornecer diversas ferramentas de análise e tratamento.

Muitos pesquisadores, utilizaram simplificações em modelos matemáticos para facilitar as simulações em CFD para estudos na área de gaseificação. Esses modelos, são revisados e as diferentes características do modelo CFD são resumidas na Tabela 2.8. O tipo de gaseificador a ser simulado, geometria, abordagens e tipo de partículas, além da influência na composição dos produtos dos gases de síntese para a validação do modelo são listados. Os modelos CFD fornecem resultados subsídios que podem ser utilizados em estudos hidrodinâmicos.

Tabela 2.8 – Revisão da modelagem CFD para gaseificação

Autores	Tipo de Gaseificador	Abordagem/Modelos	Dados de validação
Pandey <i>et al.</i> 2022	2D, DLF	E-L, κ - ϵ , DPM	A comparação do gás de produção livre de nitrogênio em diferentes razões de equivalência.
Ngamsidhipongsa <i>et al.</i> 2020	2D, DLF	κ - ϵ	Efeito da porcentagem de carbono fixo do produto de pirólise na composição do gás seco.
Jahromi <i>et al.</i> 2021	2D, DLF	E-E, κ - ϵ	Comparação porcentagem molar de gás de síntese de saída e a eficiência de conversão da simulação com dados experimentais e estudos anteriores.
Maya <i>et al.</i> 2021	3D, DLF (2 estágios)	E-E, κ - ϵ	Os resultados previstos foram comparados com resultados experimentais em diferentes faixas de operação e agentes de gaseificação.
Hwang <i>et al.</i> 2021	3D, LFB	E-L, κ - ϵ , CFD-DEM	Os efeitos de dois valores de entrada do gaseificador (taxa de fluxo de ar de aeração e taxa de alimentação de biomassa) no desempenho da gaseificação.
Ngamsidhipongsa <i>et al.</i> 2021	2D, DLF	κ - ϵ	Tanto a composição do gás produtor de PEFBs como recebidos quanto peletizados foram validados usando resultados experimentais.

DLF= *downdraft* de leito fixo/ GLF=gaseificador de leito fluidizado/GFA=Gaseificador de fluxo arrastado/Euler-lagrange=E-L/Euler-euler=E-E/DEM (inglês)= Método dos Elementos Discretos/DPM= método da fase discreta/ DOM= método das ordenadas discretas / F
N= número de fluidização

CAPÍTULO III

METODOLOGIA

3.1 SOFTWARE E HARDWARE

Os softwares utilizados foram o ANSYS FLUENT 2022 R2, que utiliza o método dos volumes finitos para a simulação numérica. Este método funciona baseado na divisão da geometria de interesse em pequenas sub-regiões, conhecidas como volumes de controle. As equações da conservação são discretizadas e resolvidas iterativamente para um número discreto de pontos. Um código em linguagem C foi escrito para introduzir a cinética da gaseificação no FLUENT, através de uma função UDF. As simulações foram realizadas em um computador com configuração básica de processador Intel(R) Core(TM) i7-4770 CPU @ 3.40GHz e memória RAM de 32,0 GB.

3.2 GEOMETRIA

A geometria simulada foi de um gaseificador de leito fluidizado borbulhante, com a geometria modelada com pseudo 2D, com 1 mm de profundidade, utilizando o domínio computacional axissimétrico, para diminuir a complexidade da simulação e esforço computacional, simplificação realizada pelos autores (Radmanesh *et al.*, 2006, Loha *et al.*, 2014; Sant'Anna *et al.*, 2015; 2017).

3.3 TESTE DE MALHA

O teste de independência de malha foi descrito em Sant'Anna (2015). Todo o domínio computacional teve sua malha estruturada em elementos hexaédricos. O teste consiste na construção de malhas, com níveis de refinamento crescente, o que implica no aumento do número de elementos. O teste é realizado para impedir que a malha adotada possa interferir nos resultados obtidos. Os dados estatísticos das malhas refinadas são apresentados na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 – Estatística das malhas da geometria

Malhas Parâmetros	Malha 1	Malha 2	Malha 3
<i>Max face size</i>	0,005	0,004	0,003
Número de nós	8216	21121	42531
Número de elementos	8000	20800	42100

Tetraedros:	0	0	0
Pirâmides:	0	0	0
Hexaedros:	8000	20800	42100
Poliedros:	0	0	0

Fonte: Próprio Autor, 2023

A qualidade da malha pode ser analisada por alguns critérios. Os analisados neste trabalho foram *Skewness*; *Element Quality* e *Orthogonal Quality*.

Foram realizadas simulações para cada uma das malhas elaboradas e escolhidas duas variáveis de análises, com vistas a identificar a interferência da malha nos resultados. Mediante a escolha da malha, foram conduzidas simulações a três temperaturas (800, 973 e 1200 K).

Os modelos simulados utilizaram as condições descritas nos itens 3.4 e 3.5, desta metodologia.

3.4 ANÁLISE E SIMULAÇÃO HIDRODINÂMICA

A análise foi baseada nas seguintes suposições: assumido uma condição de aderência na parede do reator ($u_x=u_y=u_z=0$), o oxigênio e vapor de água foram utilizados como agente de gaseificação, utilizando as informações disponíveis no banco de dados do FLUENT. A Tabela 3.2 apresenta as propriedades das fases gasosa e sólida.

Tabela 3.2 – Propriedades das fases.

Propriedades	Valores	Referência
Massa específica do ar (kg.m^{-3})	$1,23 \times 10^0$	ANSYS, 2013.
Capacidade calorífica do ar ($\text{Jkg}^{-1}.\text{K}^{-1}$)	$9,94 \times 10^2$	ANSYS, 2013.
Viscosidade do ar ($\text{kg.m}^{-1}\text{s}^{-1}$)	$1,79 \times 10^{-5}$	ANSYS, 2013.
Diâmetro da areia (μm)	$2,75 \times 10^2$	Sant'Anna, 2017.
Massa específica da areia (kg.m^{-3})	$2,50 \times 10^3$	Zhao <i>et al.</i> , 2014; Yu <i>et al.</i> , 2020.

Fonte: Adaptado de Sant'anna, 2015

A areia usada na simulação do processo no leito do gaseificador foi baseada na classificação de Geldart (1973), o material utilizado foi do tipo quartzosa e tem a função de homogeneizar a biomassa que será gaseificada no leito, utilizando a Teoria da Cinética Granular e a equação de Syamlal-O'brien (1989) para a interação entre as fases. O coeficiente de restituição entre partículas foi igual a 0,9. Na Tabela 3.3 estão os modelos de viscosidade

adotados, que foram baseados na ampla literatura descrita (TAGHIPOUR *et al.*, 2005; FEDE *et al.*, 2016; SANT'ANNA, 2017; ZOU *et al.*, 2019 e NIGMETOVA *et al.*, 2022).

Tabela 3.3 – Modelos utilizados para o cálculo das viscosidades.

Viscosidade	Referência
Viscosidade Granular	Syamlal-Obrien, 1989
Viscosidade Colisional	Gidaspow <i>et al.</i> , 1994
Viscosidade Cinética	Syamlal <i>et al.</i> , 1993
Viscosidade Friccional	Schaeffer, 1987
Viscosidade Global	Lun <i>et al.</i> , 1984

Fonte: Adaptado de Sant'anna, 2015

O sistema de Equações (Eqs. 2.37-2.40), obtido através de modelagem mecanicista, foi resolvido de forma segregada utilizando-se o método Phase Coupled SIMPLE para solução do acoplamento pressão-velocidade. Foi utilizada a discretização espacial de primeira ordem para todas as equações, exceto para a pressão, sendo esta discretizada pelo esquema de PRESTO. Para a discretização temporal foi utilizada a discretização de segunda ordem implícita. O modelo de turbulência utilizado neste trabalho foi o k- ϵ , conforme já estabelecido na literatura. O resumo dos métodos de solução está apresentado na Tabela 3.4.

Tabela 3.4 – Resumo dos métodos de solução.

Parâmetros	Método ou valores
Regime	Transiente
Passo de tempo	0,002 segundos
Tempo total da simulação	20,00 segundos
Acoplamento pressão-velocidade	Phase-Coupled SIMPLE
Gradiente	Green-Gauss Cell-Based
Pressão	PRESTO!
Momento	First Order Upwind
Energia Cinética Turbulenta	First Order Upwind
Taxa de Dissipação turbulenta	First Order Upwind
Energia	First Order Upwind
Fração Volumétrica	First Order Upwind

Fonte: Próprio Autor, 2023

As simulações para o sistema, foram conduzidas para condições de altura do leito (H) 0,6 m, altura do reator (Z) em 1,0 m, diâmetro do reator (D_r) 0,28 m, o fator de ar (F_{ar}) de 0,25, a velocidade superficial do ar (U_o) foi fixada em $0,38 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ esse valor de velocidade foi utilizado nos trabalhos de Taghipour *et al.*, (2005) e de Sant'Anna *et al.*, (2017) para fluidização

borbulhante. Sendo assim, as simulações foram feitas de acordo com a geometria e os parâmetros fluidodinâmicos referente a Tabela 3.5.

Tabela 3.5 – Parâmetros da Simulação

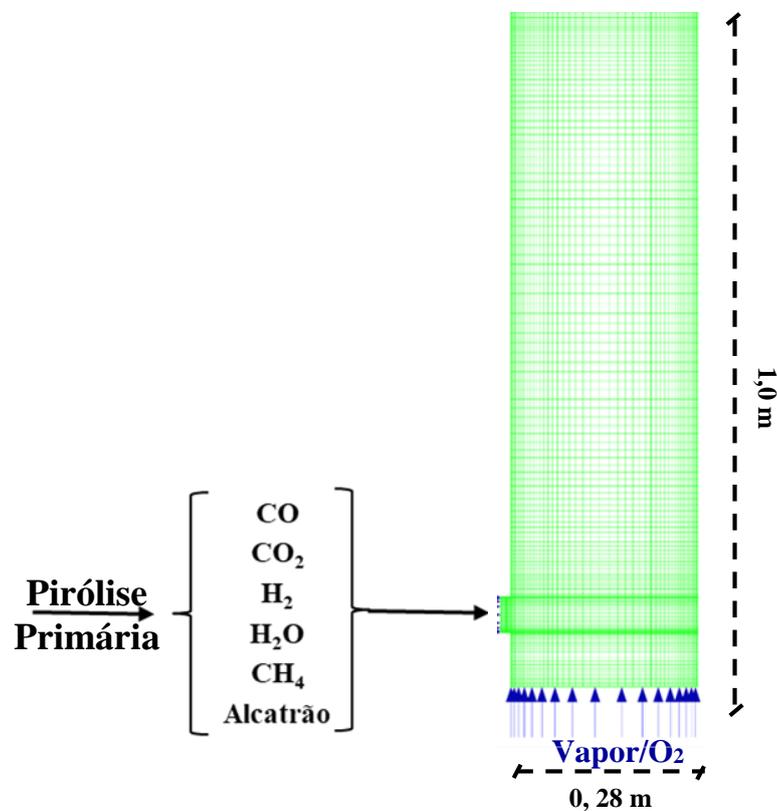
Características do reator e da fluidização					
H (m)	Z(m)	D _r (m)	F _{ar}	U _o (m.s ⁻¹)	T (K)
0,6	1,0	0,28	0,25	0,38	973

Fonte: Próprio Autor, 2023

3.5 CINÉTICA DO PROCESSO DE GASEIFICAÇÃO

A etapa da gaseificação depende da inserção da cinética ao processo hidrodinâmico, descrito nos itens anteriores. Para isso, foi realizada a simplificação, que faz da pirólise a condição inicial. A Figura 3.1, ilustra as dimensões do reator na simulação, com os gases da pirólise e o alcatrão na entrada lateral e agente gaseificante vapor/oxigênio no fundo do reator.

Figura 3.1 – Esquema da simulação do processo de gaseificação

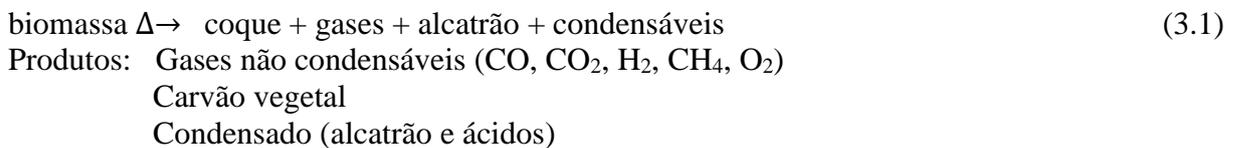


Fonte: Próprio Autor, 2023

A gaseificação do carvão, foi implementada através da utilização das taxas cinéticas da gaseificação descritas na Tabela 2.7. Para se fazer uso das equações heterogêneas, foi necessário a elaboração de uma UDF, conhecida como função *user-defined*, uma função escrita em C, que pode ser carregada dinamicamente com o solucionador (ANSYS, 2013). Enquanto as homogêneas, foram escritas diretamente no próprio ANSYS FLUENT, pois o programa dispõe de entrada para cinética do tipo Arrhenius.

Foi realizado um estudo prévio da taxa de craqueamento do alcatrão, por ser uma reação importante que define os produtos gasosos que entram no reator como condição de contorno.

- *Pirólise primária:*



- *Craqueamento do alcatrão:*



Maya *et al.*, (2021) relata que, no processo de modelagem de um gaseificador, pode-se especificar a composição do gás produzido no equilíbrio através de equações termoquímicas, também conhecido como modelo 0 D. Essas equações, descrevem o estado de equilíbrio das reações básicas, inerentes à gaseificação, em função das principais variáveis pertencentes ao processo como pressão, temperatura, teor de oxigênio no agente gaseificador, tipo de combustível e umidade do combustível. Todo gaseificador tem uma etapa de pirólise antecipando a etapa de gaseificação e as reações envolvidas podem ser analisadas.

Neste trabalho, todos os resultados mostrados são para a validação da cinética de Nunn *et al.*, (1985).

A construção do modelo cinético da gaseificação foi realizada em duas etapas. Foram adotadas duas simplificações, sendo a primeira considerando que a pirólise primária acontece na alimentação do reator, de acordo com Radmanesh *et al.* (2006), além de considerar a decomposição direta da biomassa em cada produto *i* por uma única reação independente, ou seja, sofre craqueamento de forma instantânea ao entrar no gaseificador. O resultado da pirólise primária, foi utilizado no modelo em CFD como condição de contorno na alimentação da biomassa. O modelo da taxa cinética, para pirólise primária usada no referente trabalho, encontra-se descrito em Nunn *et al.*, (1985) e os parâmetros usados estão na Tabela 3.6. A taxa de formação do produto *i* por kg de biomassa é dado pela Equação 3.3 (NUNN *et al.*, 1985).

$$\frac{dV_i}{dt} = (V_i^* - V_i)k_{oi} \left(\frac{-E}{RT} \right) \quad (3.3)$$

A segunda simplificação estabelecida foi com consideração o alcatrão que, por ser uma mistura com diferentes componentes, torna difícil a avaliação de suas propriedades físicas e químicas. Melo (2012) utilizou o bio-óleo ou alcatrão no modelo matemático é representado por um composto fenólico que é produzido no processo de pirólise primária na entrada da alimentação. Costuma-se, em termos de modelagem, assumir um composto representativo para o alcatrão. A maioria dos alcatrões possui cerca de 75% de fenol (C₆H₆O), sendo esse o composto chave, escolhido neste trabalho para representá-lo. Tal suposição pode ser encontrado em Kannari *et al.*, (2017), Gai *et al.*, (2015).

Tabela 3.6 – Parâmetros da cinética de primeira ordem para pirólise primária

Componentes	$\log k_{oi} \left(\frac{1}{s} \right)$	$E_i \left(\frac{kJ}{mol} \right)$	$V_i^* \left(\frac{kg}{kgbiomassa} \right)$
Total de voláteis	8,30	133,01	0,969
Total de gás	2,88	49,37	0,476
H ₂	6,17	114,18	0,0016
CH ₄	13,00	251,21	0,0241
C ₂	9,06	173,85	0,1227
CO	11,75	220,66	0,2164
CO ₂	5,39	97,99	0,0308
H ₂ O	6,71	103,01	0,0804
Carvão	Carvão = 1 - total de voláteis		
Bio-óleo	Bio-óleo = total de voláteis – total de gás		

Fonte: Nunn *et al.*, 1985

Tabela 3.7 – Parâmetros da cinética de primeira ordem para pirólise primária

Componentes	$\log k_i \left(\frac{1}{s} \right)$	$E_i \left(\frac{kJ}{mol} \right)$	$V_i^* \left(\frac{kg}{kgbiomassa} \right)$
Total de voláteis	4,53	69	92
Total de gás	4,53	49,3	41
H ₂	6,7	112,86	2
CH ₄	3,79	69,4	3,6
CO	3,36	61,03	17
CO ₂	3,77	59,77	6
H ₂ O	3,35	48,07	5,14
Carvão	Carvão = 100-total de voláteis		
Bio-óleo	Bio-óleo = total de voláteis – total de gás		

Fonte: Radanesh *et al.*, 2006

CAPÍTULO IV

RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 ANÁLISE E SIMULAÇÃO HIDRODINÂMICA

Durante o processo de fluidização, a pressão manométrica sofre alterações devido à redistribuição da massa de sólidos, que por sua vez influencia o volume do leito e sua porosidade. A fim de ilustrar essa dinâmica, a Figura 4.1 apresenta os perfis longitudinais de queda de pressão obtidos para as três malhas em diferentes momentos de simulação (0,5; 1; 5; 10; 15 e 20 s). A velocidade superficial do gás adotada nesta simulação foi de $0,38 \text{ m.s}^{-1}$.

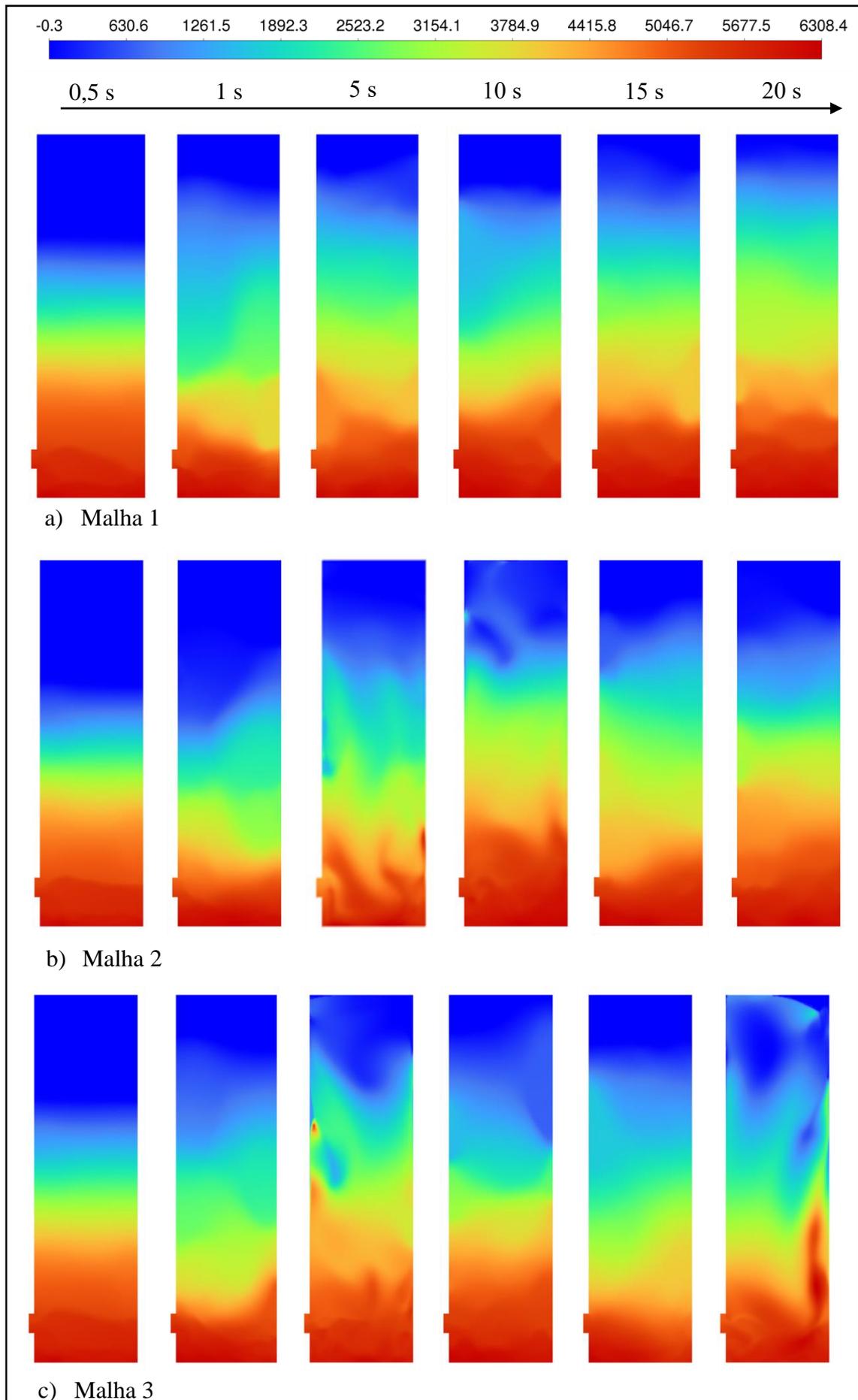
Os perfis de pressão demonstram que o comportamento dessa variável é semelhante nas três malhas testadas. Verifica-se que, no tempo de 0,5 s, o leito permanece fixo em ambas as malhas. Quando associamos as baixas velocidades superficiais do gás, o fluxo de gás através do sistema de leito fluidizado é insuficiente para suspender quaisquer partículas, mantendo assim o leito estacionário. Para essas velocidades superficiais mais baixas, a queda de pressão do leito através do sistema é aproximadamente proporcional à velocidade superficial do gás.

A partir do tempo de 5 s, são observadas flutuações nos valores da pressão, sendo mais notório nas malhas 2 e 3, indicando a movimentação da fase particulada com passagem da fase gasosa, que acontece quando as partículas começam a colidir umas com as outras, causando interações simultâneas partícula-partícula e partícula-ar no sistema e o estabelecimento do regime de fluidização.

Para o tempo de 20 s, as malhas 2 e 3 pode-se observar o aumento da queda de pressão, principalmente na malha 3, que cria bolhas e faz com que as partículas se comportem como um líquido. Há resistência oferecida pelas partículas sólidas em movimento e às interações entre as partículas e o fluido. À medida que a vazão aumenta, a queda de pressão geralmente aumenta também, uma vez que as partículas precisam superar uma maior resistência. Logo, o fluxo gás-sólido tende a se tornar mais uniforme em condições de pressão mais elevadas. Esse comportamento sugere uma distribuição mais equilibrada da massa de sólidos ao longo do leito, resultando em uma maior homogeneidade do fluxo gás-sólido (DU *et al.*, 2023).

Essa uniformidade é desejável em aplicações industriais, pois contribui para uma operação mais eficiente e estável do sistema fluidizado. Além disso, uma distribuição uniforme do fluxo gás-sólido também contribui para garantir uma eficaz transferência de calor e massa no leito fluidizado.

Figura 4.1 – Perfis longitudinais de queda de pressão para as malhas: a) Malha 1; b) Malha 2 e c) Malha 3



4.2 ESCOLHA DA MALHA

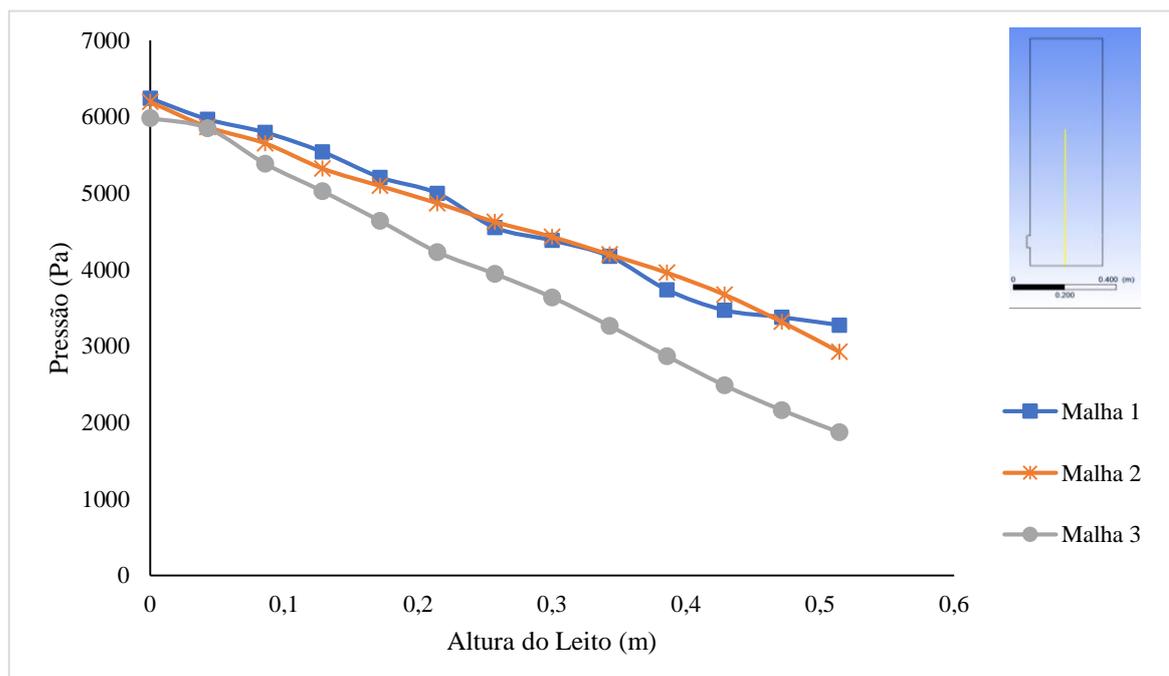
De acordo com os padrões de qualidade de malha, é desejável que os parâmetros de *Element Quality* médio e *Orthogonal Quality* médio se aproximem de 1, e que o *Skewness* médio se aproxime de 0 (ANSYS, 2013). Esses valores indicam uma malha de alta qualidade. No contexto dos testes realizados, todas as malhas utilizadas demonstraram valores próximos aos recomendados, como observado na Tabela 4.1.

Tabela 4.1- Parâmetros que avaliam a qualidade das malhas

Malhas Parâmetros	Malha 1	Malha 2	Malha 3
<i>Skewness</i> médio	$4,8711 \times 10^{-4}$	$5,3561 \times 10^{-5}$	$5,3189 \times 10^{-5}$
<i>Element Quality</i> médio	0,998663	0,99947	0,99947
<i>Orthogonal Quality</i> médio	0,999996	0,999999	0,999999

Com o intuito de avaliar o impacto da malha nos resultados, foram selecionadas as variáveis pressão e altura do leito. Para garantir a validação da análise, foram geradas curvas que representam a queda de pressão ao longo da altura do leito, considerando as diferentes malhas analisadas (conforme ilustrado na Figura 4.2).

Figura 4.2- Pressão versus altura do leito para diferentes malhas ($v_g = 0,38 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, $t = 20 \text{ s}$)



Fonte: Próprio Autor, 2023

Após análise das informações representadas na Figura 4.2, constatou-se que as curvas geradas a partir das Malhas 1 e 2 exibiram similaridade, se sobrepondo em alguns pontos, para os parâmetros em avaliação. Comparado o resultado com a Tabela 4.1, que analisa os parâmetros de qualidade da malha, nota-se que os valores para Malha 2 e 3 são bastante próximos e apresentam melhor qualidade que a Malha 1. No entanto, quando se considera o esforço computacional necessário para a realização da simulação, temos que a Malha 2 apresenta um número de elementos menor que a Malha 3, corroborando com a escolha da Malha 2 para dar sequência aos estudos necessários no presente trabalho.

4.2.1 Análise Hidrodinâmica para Malha 2

Neste estudo, as simulações foram realizadas para a biomassa de madeira (particulada) em um reator de leito fluidizado borbulhante. A temperatura de operação é crucial para o desempenho da gaseificação da biomassa. As simulações de gaseificação foram realizadas para três diferentes temperaturas (800 K, 973 K e 1200 K) e areia quartzosa utilizada como material de leito.

A Figura 4.3 apresenta as frações volumétricas da fase particulada, demonstrando a formação de bolhas em diferentes temperaturas dentro do gaseificador. No início ($t = 0$ s), é gerado um leito compactado no sistema. A mistura das partículas de areia e biomassa são coloridas de vermelho e empacotadas com uma altura de 0,6 m. Em seguida, os gases da pirólise são inseridos no reator através da entrada lateral, enquanto o agente gaseificante, composto por uma mistura de vapor (H_2O) e oxigênio (O_2), são introduzidos na parte inferior do leito. Conseqüentemente, no fundo do reator, podemos observar a formação de bolhas relativamente pequenas. À medida que o vapor e o oxigênio arrastado são fornecidos abaixo da alimentação dos gases, resultando em um movimento ascendente significativo da fase particulada ($t = 0,5$ s). Com o passar do tempo, as bolhas sobem ao longo do reator e aumentam de tamanho na direção axial. Conforme as bolhas se expandem, elas podem se fundir com outras bolhas menores formadas no fundo do reator, formando bolhas maiores que estouram na superfície do leito. Esse fenômeno também foi observado por Wang *et al.*, (2017).

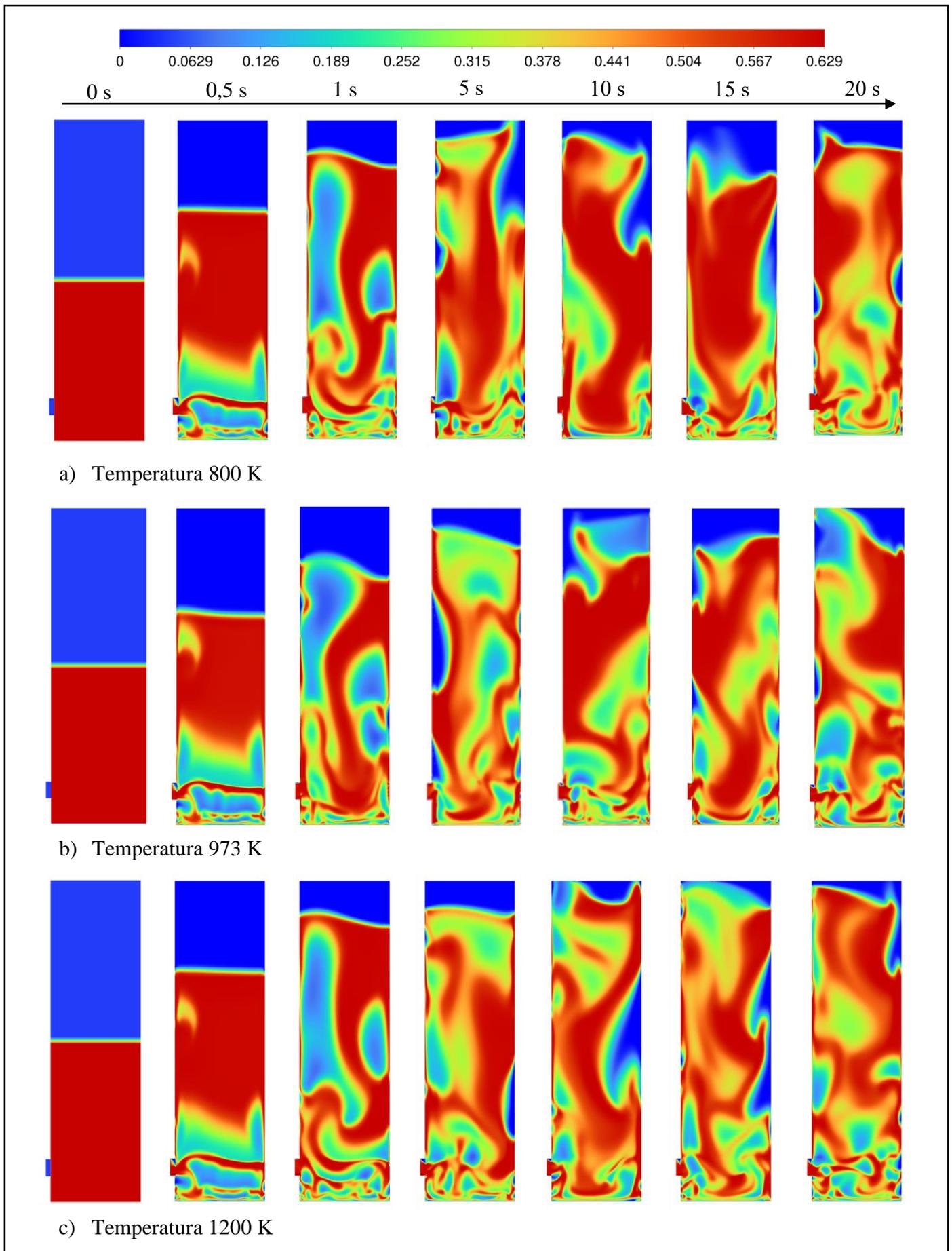
Quando a altura do leito atinge seu valor máximo, a bolha colapsa. Partículas de areia e biomassa são lançadas para a borda livre no $t = 1,0$ s. Em $t = 5$ s, o gás continua ascendendo pelo leito, enquanto que as partículas seguem recirculando pelo mesmo. Novas bolhas são formadas continuamente na região inferior do leito em $t = 10$ s. A turbulência do gás e a intensa interação entre as partículas e o gás favorecem as reações químicas, os padrões de fluxo instantâneo não são simétricos.

A dinâmica do leito sofre influência da injeção de biomassa pela entrada lateral, onde assumiu-se a ocorrência da pirólise instantânea da biomassa. As bolhas, que passam perto da entrada lateral de biomassa, interagem com os gases gerados no processo de desvolatilização e tornam-se consideravelmente grandes em tamanho e estouram-se. Segundo Loha *et al.*, (2014), esse efeito da injeção lateral intervém diretamente na dinâmica do leito sendo mais intensa devido ao diâmetro e altura do leito serem menores.

Conforme Sant'Anna (2017), quando as partículas de biomassa e areia possuem diâmetros próximos, o efeito de segregação é minimizado. A obtenção de uma mistura homogênea ao longo de todo o processo é uma condição crucial para o funcionamento adequado do leito fluidizado. Essa ocorrência é atribuída à diferença de diâmetros entre as partículas que compõem a fase sólida do leito (d_{Areia} e d_{Biomassa}), que possuem tamanhos de 250 e 350 μm , respectivamente. Nesse sentido, a aplicação da técnica de fluidodinâmica desempenha um papel essencial ao analisar o efeito da mistura entre biomassa e areia, permitindo a redução do impacto da segregação.

Para Wang (2020) e seus colaboradores, que utilizaram a madeira de pinho como biomassa. A validação do experimental com simulação, ocorreu no tempo de 20 s de simulação, e o estado estacionário foi alcançado no tempo de 2,5 s e temperatura de 1093,15 K, corroborando com esse trabalho.

Figura 4.3 - Fração volumétrica na fase 2 (fase particulada) para as temperaturas:
a) 800 K, b) 973 K e c) 1200 K



4.2.2 Análise da Composição do Gás através das Temperaturas

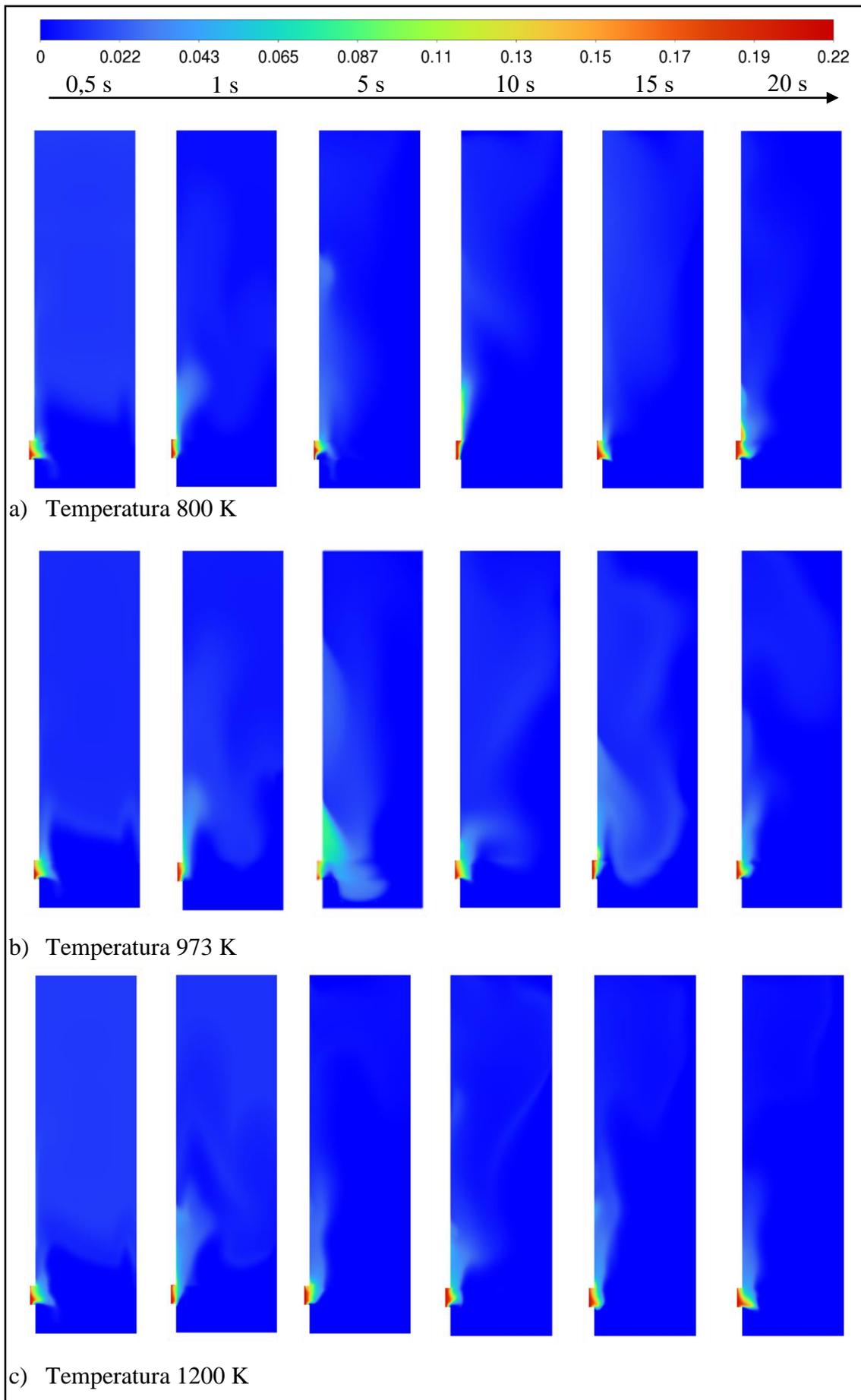
Os perfis de frações molares de CO, CO₂, O₂, H₂, CH₄ e fenol são apresentados nas Figuras de 4.4 a 4.9, respectivamente. Estes perfis foram obtidos nas mesmas condições de operação, nos diferentes tempos de simulação (0; 0,5; 1; 5; 10; 15; 20 s) e nas temperaturas especificadas.

A Figura 4.4 ilustra a fração molar do monóxido de carbono na fase gasosa (fase 1), sendo possível observar um aumento da concentração de CO, a partir do tempo ($t = 5s$) para a temperatura de 1200 K e diminuir o consumo dentro do gaseificador com tempo ($t = 15s$), na temperatura de 800 K.

As partículas de carvão vegetal injetadas, são diretamente arrastadas pelo fluxo de gás e sobem ao longo da parte esquerda do gaseificador, elevando a fração mássica de produtos gasosos nesta região, devido ao processo de pirólise. Além disso, observa-se, que não há gás de síntese abaixo da altura de 0,1 m. O motivo é que o leito de entrada convencional, possui uma “zona morta”. Esta zona possui baixa quantidade de partículas de biomassa, isso implica na circulação interna de partículas, contribuindo em geração inferior de gás de síntese.

O agente de gaseificação influencia na formação dos produtos. No caso do CO, a sua diminuição, é dada pela reação de deslocamento da água, que é uma reação exotérmica, para baixas temperaturas do gás, é produzido mais CO₂ e H₂, significando um maior consumo de CO e H₂O, o que é coerente com o comportamento da temperatura em 800K. Isso ocorre porque a diminuição da temperatura ajuda a conduzir a reação na direção de formação desses produtos. Mendoza (2009) trabalhou com diversos agentes de gaseificação com a biomassa de cana de açúcar, dentre eles, vapor-oxigênio. A autora comprovou a diminuição do teor de monóxido de carbono, sendo favorecida pela adição de vapor de água ao ar de gaseificação. Esse processo acontece através da Equação 2.54, em uma faixa de temperatura ($1053 - 1100 \text{ C}^\circ \cong 776 - 826 \text{ K}$), corroborando com os resultados de baixa formação na temperatura de 800K.

Figura 4.4 - Fração molar do CO na fase 1 (fase gasosa) para as temperaturas: a) 800 K, b) 973 K e c) 1200 K



A distribuição da concentração de CO_2 é a oposta em relação ao CO , que aumenta ao longo da altura do reator, decorrente da diminuição do carbono sólido e da combustão do material volátil. À medida que aumenta a temperatura dentro do reator, ocorre o consumo parcial do carvão, elevando a taxa cinética da combustão na entrada do reator. Assim, com o tempo de residência mais longo e a temperatura elevada da fase gasosa, aumenta a taxa de reação de deslocamento água-gás. Portanto, a fração de massa de CO_2 perto da parede é maior e aumenta para cima do leito.

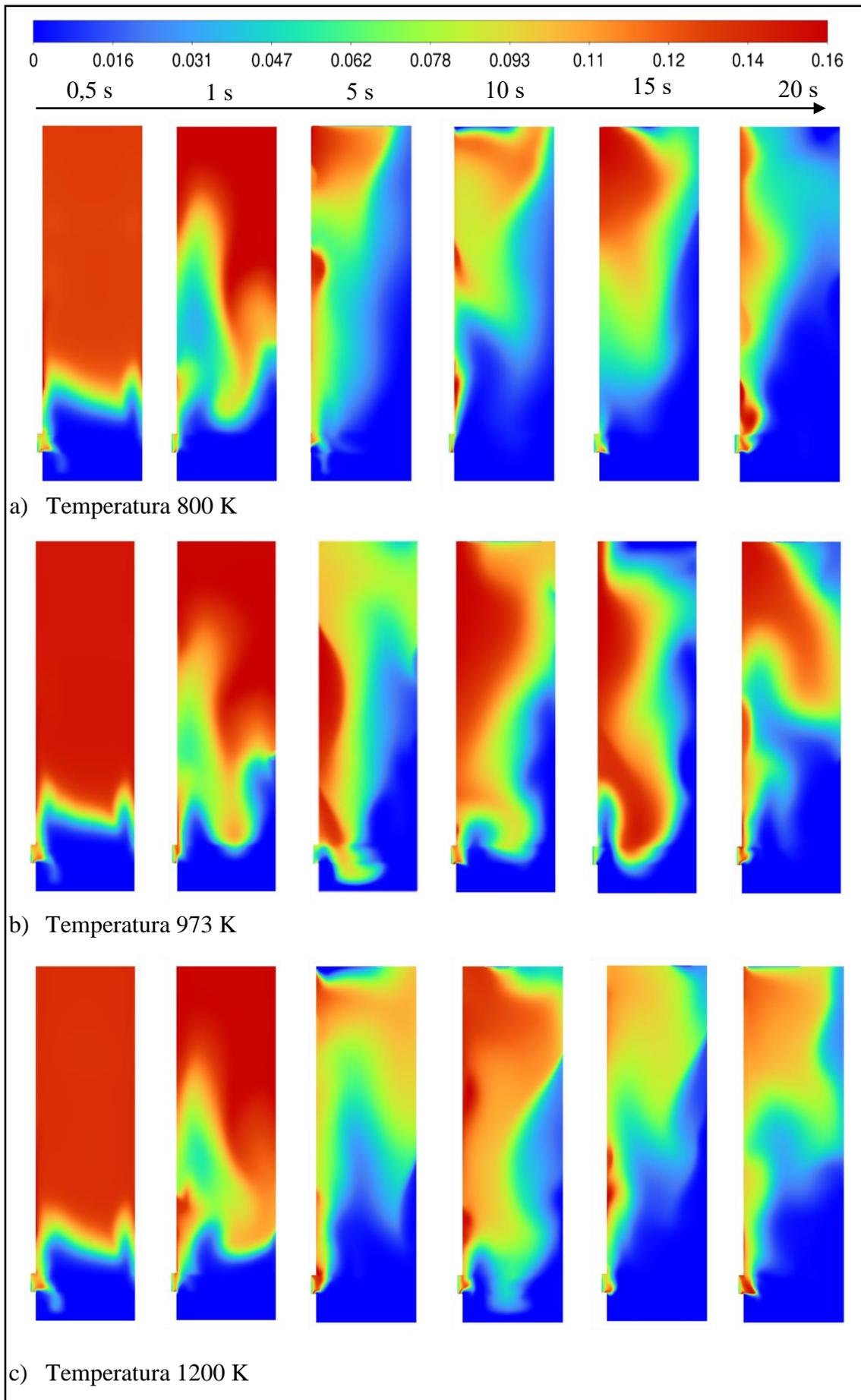
Na Figura 4.5, a fração molar do CO_2 , possui uma concentração mais alta na parte inferior do gaseificador na região ao redor da entrada. Isto pode ser atribuído ao acúmulo de produtos de pirólise na zona de recirculação. A medida que percorre o tempo, a concentração torna-se baixa devido a velocidade do gás no fundo do reator.

Monteiro (2017) analisou a biomassa *Miscanthus* para diferentes temperaturas (1023, 1073 e 1123 K), observando a diminuição no teor de CO_2 dentro da faixa de temperaturas estudada por este autor. Isso acontece devido ao consumo de CO_2 nas reações de Boudouard e reforma do alcatrão. Além disso, em temperaturas elevadas no gaseificador, como observado no perfil para temperatura de 1200 K no tempo de 20s, apresenta uma redução no rendimento de CO_2 . O comportamento semelhante foi observado no estudo de Yang (2023) e seus colaboradores no tempo de 19 s e temperatura de aproximadamente 1093 K. Isso pode ser justificado pelo deslocamento exotérmico da reação de gás-água para o lado do H_2O e CO .

Para a temperatura de 800 K, mesmo com tempo de 20 s de simulação, observa-se na entrada lateral uma maior concentração de CO_2 . Analisando esse comportamento, indica que a gaseificação a vapor em temperaturas mais baixas (aproximadamente 873 K) resulta em valores ideais de poder calorífico. Essa constatação foi explicada no estudo recente conduzido por Li (2021) e seus colaboradores através da criação de um modelo preditivo, para faixa de temperatura (600°C) utilizando para gaseificação a biomassa de resíduos agrícolas e como agente gaseificante o vapor.

As maiores conversões de carbono são alcançadas em temperaturas mais altas; isto é explicado pelo fato de que há menores quantidades de oxigênio disponível, resultando em menor conversão do carbono fixo.

Figura 4.5 - Fração molar do CO₂ na fase 1 para as temperaturas: a) 800 K, b) 973 K e c) 1200 K



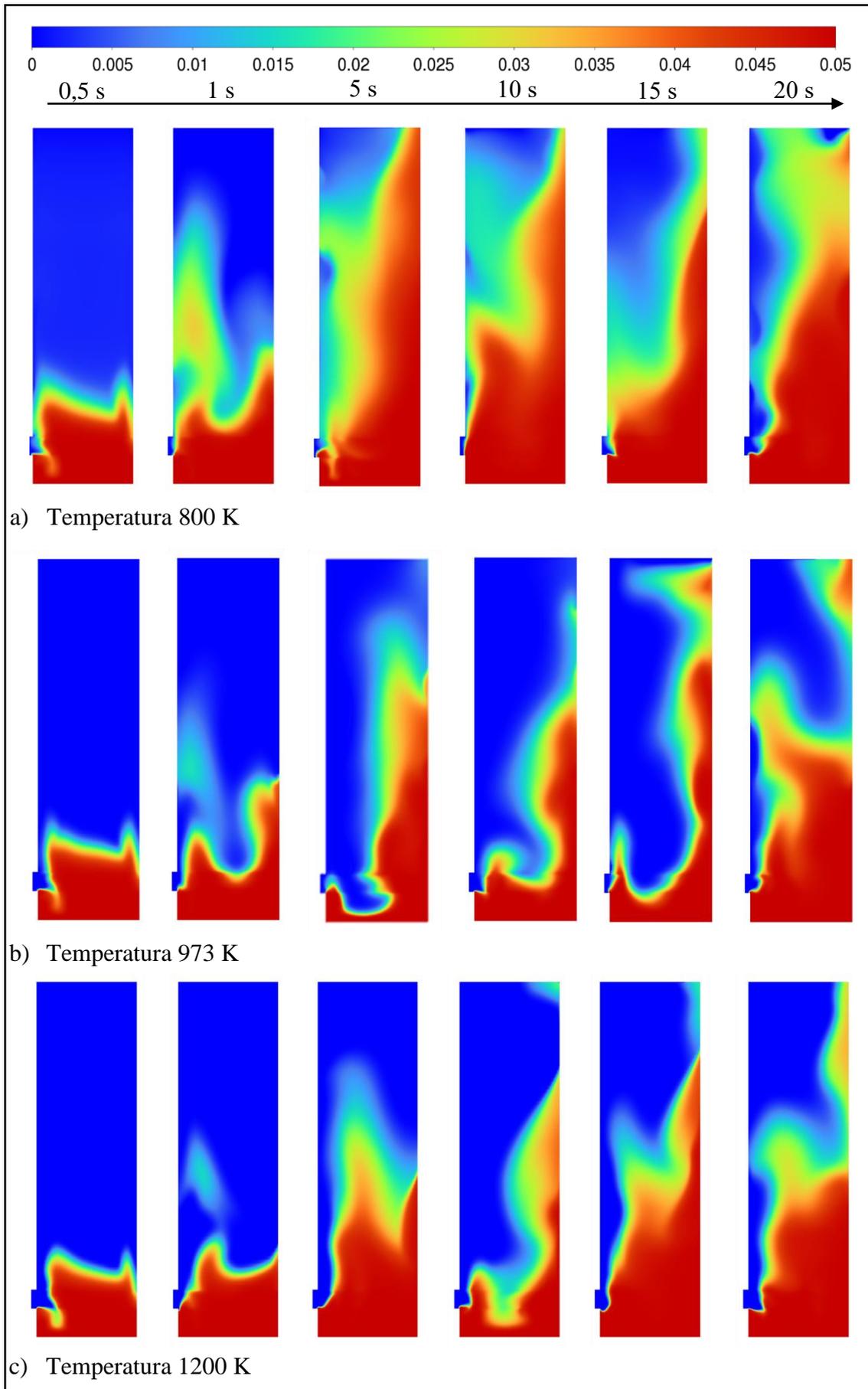
Os perfis de CO_2 e O_2 apresentam um comportamento oposto, ao longo do gaseificador. No fundo do reator, próximo à entrada de ar, observa-se a concentração máxima de O_2 . Durante a gaseificação, o calor necessário para as reações endotérmicas é gerado pela combustão de alguns compostos voláteis, resultando na produção de CO_2 e no consumo de O_2 nas regiões ao longo do gaseificador.

Esse fenômeno é confirmado pela Figura 4.6, que ilustra a fração molar do oxigênio no gás (fase 1). Nas proximidades da entrada lateral ($t=0,5\text{s}$), para as três temperaturas, o O_2 esgota-se rapidamente, devido às reações de oxidação, criando uma zona de reação localizada no leito, dominada pela conversão heterogênea do carvão. Essa distribuição desigual das concentrações de O_2 e CO_2 ao longo do reator é influenciada pelo fluxo de reagentes e produtos, demonstrando a dinâmica complexa entre esses gases no processo de gaseificação.

Pode ser comprovado em Loha *et al.*, (2014) mostraram que, devido à reação do oxigênio na porção inferior do gaseificador, não há presença de O_2 na região da borda livre após tempo de 25s. Essa constatação indica que a depleção de oxigênio ocorre simultaneamente com o processo de pirólise, em temperatura de aproximadamente 1073 K, reforçando a evidência no perfil para a temperatura de 1200 K no tempo de 20s. Um perfil semelhante foi encontrado no estudo de Monteiro (2018) e seus colaboradores usando um leito fluidizado borbulhante para gaseificação do caroço do pêssego português em uma faixa de temperatura de 750 – 850°C (1023,15 – 1123, 15 K).

A presença adequada de oxigênio é crucial para garantir uma gaseificação eficiente e otimizar o desempenho do processo. Uma concentração insuficiente de oxigênio pode resultar em uma gaseificação incompleta, levando à formação de subprodutos indesejados, como alcatrão e compostos orgânicos voláteis. Por outro lado, um excesso de oxigênio pode levar a uma combustão excessiva, reduzindo a formação de gases de síntese e diminuindo a eficiência global do processo.

Figura 4.6 - Fração molar do O_2 na fase 1 para as temperaturas: a) 800 K, b) 973 K e c) 1200 K

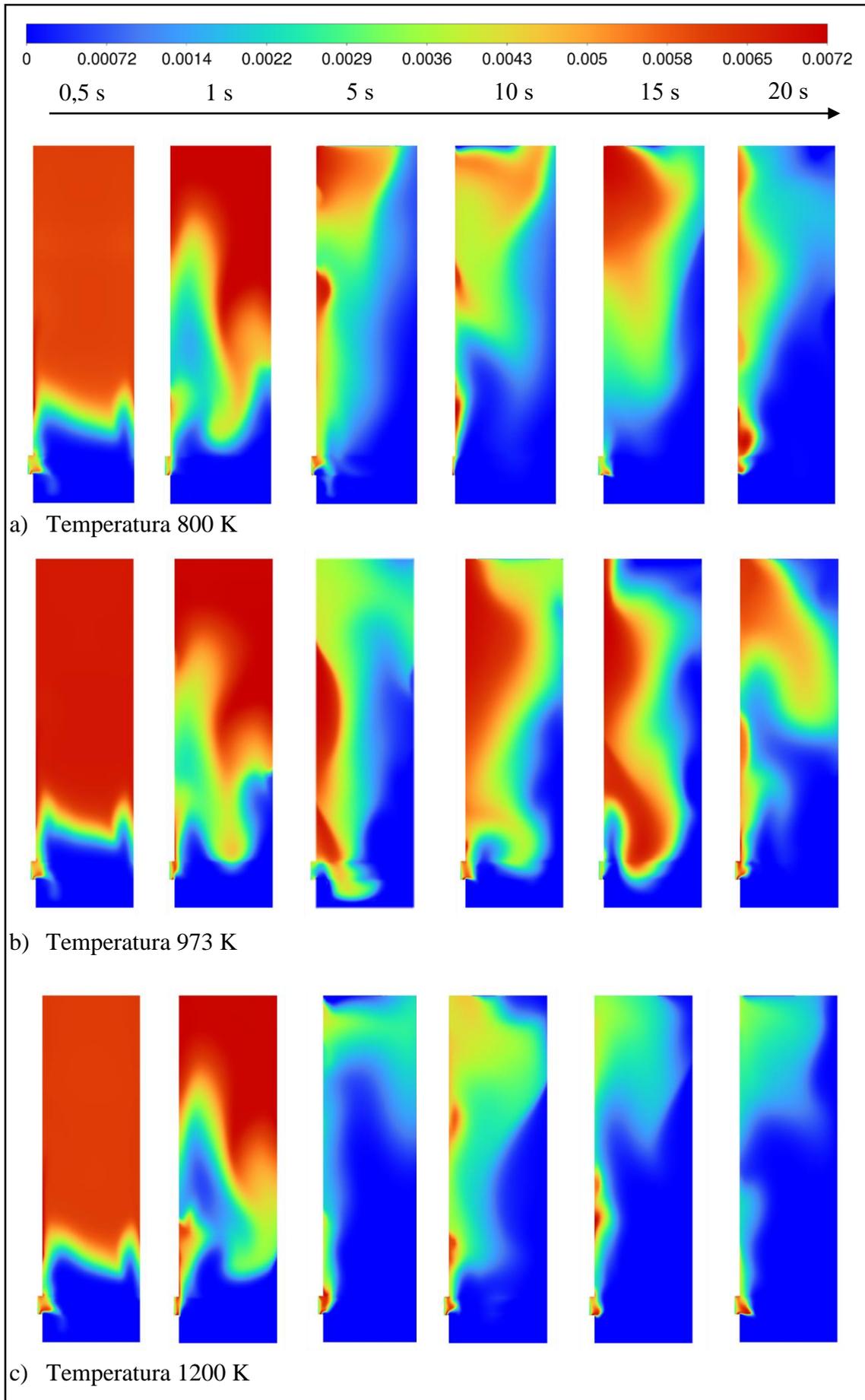


A temperatura de operação do gaseificador desempenha um papel importante no processo de gaseificação. Logo, a composição do gás é o resultado de um conjunto complexo de reações intermediárias, sendo o H_2 um dos produtos mais relevantes. A análise desses parâmetros é fundamental para compreender e otimizar a produção de H_2 durante o processo de gaseificação.

A Figura 4.7 ilustra os perfis da concentração de H_2 durante a gaseificação nas diferentes temperaturas, favorecendo a distribuição desse gás ao longo do sistema. Inicialmente ($t=0,5s$), para as três temperaturas a composição de entrada da formação de H_2 é igual, assim como para os outros gases estudados. Com o aumento do tempo de simulação, ocorre o favorecimento da gaseificação a baixa temperatura e com isso uma maior formação de CO_2 e H_2 , e menor concentração de CO no gás. Esta tendência pode ser observada nos perfis da temperatura de 800 K, pois, temperaturas elevadas deslocam o equilíbrio das reações endotérmicas (KARMAKAR *et al.*, 2013). Além da razão acima, a reação de deslocamento de gás da água é exotérmica, portanto é deslocada para o lado reagente, produzindo mais H_2 .

Verifica-se para as duas temperaturas mais elevadas (973 e 1200 K), que a formação de H_2 é menor. Na temperatura de 1200 K, a taxa de aumento de H_2 diminui à medida que a reação água-gás se desloca para sentido dos reagentes, notando o aumento das espécies de CO e o H_2O , segundo o princípio de Le Chatelier. A medida que diminui a taxa de produção do H_2 em temperaturas elevadas, ocorre o aumento da concentração de CH_4 (Equação 2.48). Tendências semelhantes de aumento de H_2 foram observadas por Xue (2014) e seus colaboradores, que analisaram a influência da temperatura no leito fluidizado borbulhante (660–850 °C), utilizando a biomassa de *Miscanthus × giganteus*. Observaram ainda que acima de 850 °C (\cong 1123 K) não há melhora no rendimento do hidrogênio em função da temperatura. O mesmo foi observado no estudo de Manu e Madav (2022), com temperaturas acima de 800 °C (1073 K) e biomassa de casca de arroz.

Figura 4.7 - Fração molar H_2 na fase 1 para as temperaturas: a) 800 K, b) 973 K e c) 1200 K



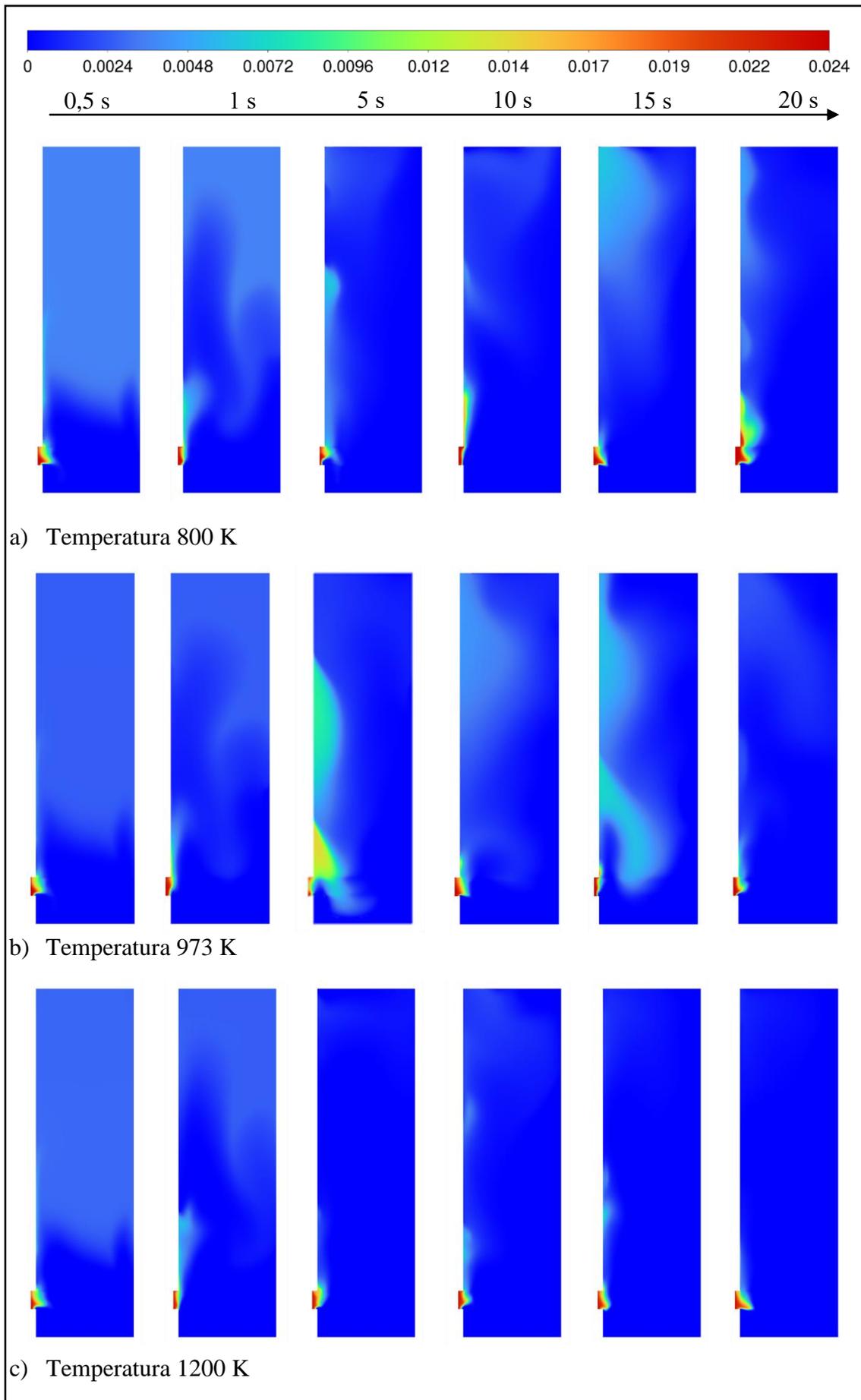
O teor de CH_4 é inversamente proporcional à temperatura de gaseificação. O metano atua como um agente redutor, reagindo com o oxigênio presente no leito fluidizado para formar monóxido de carbono e água. Essa reação exotérmica libera calor, o que ajuda a fornecer a energia térmica necessária ao processo.

O metano também pode fornecer hidrogênio adicional ao sistema, que é um dos mais importantes componentes do gás de síntese. Logo nos primeiros segundos de gaseificação, ajuda a criar uma região redutora no leito, promovendo a quebra das ligações químicas.

Na Figura 4.8, observa-se os perfis para temperatura de 800 K, quando o CH_4 pôde reagir com o oxigênio presente no leito fluidizado para formar principalmente dióxido de carbono (CO_2) e água (H_2O). A quantidade de CH_4 consumido nessa faixa de temperatura pode ser significativa, pois é uma reação exotérmica de deslocamento água-gás que é favorecida em baixas temperaturas. Essa composição é similar ao estudo de Faraji e Saidi (2022), que simulou o processo de gaseificação de biomassa da casca de amendoim, em função da temperatura do gaseificador na faixa 500–1000 °C (800-1200 K). A composição do CH_4 foi mais elevada na faixa de 500 -550 °C.

Em temperaturas mais altas como 973 e 1200 K, observa a diminuição na composição do metano, fato relato também por Eri *et al.* (2018), Li *et al.* (2021), Maya *et al.* (2021). O metano pode sofrer reações adicionais, como a reforma a vapor, em que interage com vapor de água para formar CO e H_2 . Isso acontece em temperatura mais alta e resulta na diminuição no teor de CH_4 . Dessa forma, por ser uma reação endotérmica, pode contribuir para a formação de alcatrão e outros subprodutos indesejáveis.

Figura 4.8 - Fração molar do CH_4 na fase 1 para as temperaturas: a) 800 K, b) 973 K e c) 1200 K



4.3 PIRÓLISE PRIMÁRIA

A produção de alcatrão foi relativamente elevada para a cinética avaliada, com média em torno de 50%, assim como a produção de carvão vegetal, chegando a 9%, valor superior ao relatado por Nunn *et al.*, (1985) e Radmanesh *et al.*, (2006). E, pelos resultados, pode-se inferir que as reações heterogêneas no processo de gaseificação da madeira não têm uma importância relevante para se definir a proporção molar de gases do processo, devido à baixa produção de carvão vegetal da pirólise primária. De acordo com Ji *et al.*, (2009), o craqueamento do alcatrão, também chamado de pirólise secundária, tem um significativo efeito na composição final do gás no processo, porque cerca de 50% em massa da biomassa é craqueada na forma de alcatrão conforme pode ser visto na Tabela 4.2. Isso acontece, pois no início da pirólise, uma grande quantidade de alcatrão é produzida. Conforme a temperatura aumenta, ocorre a reação com outros compostos e eventualmente, o alcatrão se converte em outras formas. O alcatrão tende a diminuir gradualmente e, em alguns casos, pode ser completamente consumido e convertido em benzeno, naftaleno e outras espécies gasosas (CO, H₂ e CH₄), quando a temperatura é suficientemente alta.

Tabela 4.2 - Resultados da pirólise primária para diferentes cinéticas

Produtos da Pirólise Primária	Radmanesh <i>et al.</i> , 2006	Nunn <i>et al.</i> , 1985	Este Trabalho
Alcatrão	0,510	0,493	0,493
Carvão	0,080	0,031	0,090
H ₂	0,020	0,002	0,085
CH ₄	0,035	0,018	0,058
CO	0,170	0,214	0,294
CO ₂	0,060	0,031	0,082
H ₂ O	0,051	0,080	0,612

Fonte: Próprio Autor, 2023

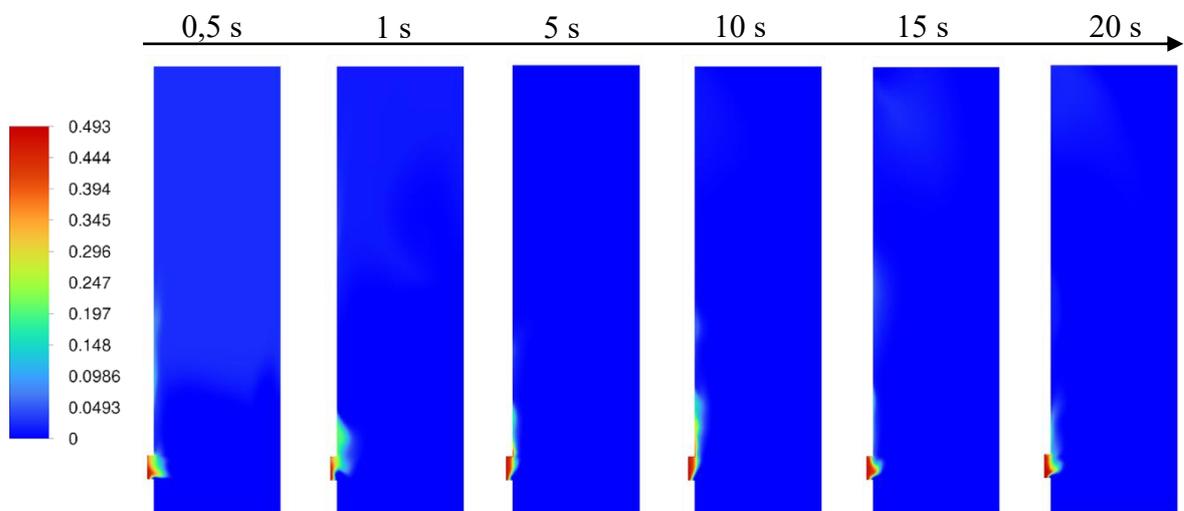
A conversão da biomassa em biocombustíveis gasosos a partir da gaseificação é geralmente vista como uma das opções mais promissoras para a produção de biocombustíveis. Contudo, a geração de alcatrão é um empecilho durante o processo de conversão termoquímica. Han (2008) e seus colaboradores relataram que, por ser um subproduto, o alcatrão será condensado quando a temperatura for inferior ao seu ponto de orvalho, ocasionando o depósito nos equipamentos do processo como motores, filtros e turbinas. Além do mais, a geração de alcatrão, limita o uso dos gases produzidos na gaseificação, causando contaminação das espécies.

Zhao (2017) e seus colaboradores estudaram o impacto da temperatura na produção de voláteis proveniente do bio-óleo partir de pirólise de celulose, hemicelulose e lignina. Sendo os

compostos fenólicos são principalmente liberados a partir de componentes da lignina, que se decompõem em temperaturas mais elevadas e em uma faixa de temperatura mais ampla em comparação com a celulose e a hemicelulose (entre 215°C e $585^{\circ}\text{C} \approx 488$ e 858 K). A 600°C (873 K), os compostos fenólicos a principal fração e distribuídos no reator.

O aumento da temperatura no leito, favorece o craqueamento térmico do alcatrão. O estudo de Vivanpatarakij (2013) e seus colaboradores constataram que quando se opera o gaseificador com temperatura operacional inferior a 973 K, o fenol é o principal componente do alcatrão, ou seja, os alcatrões primários começam a se reformar e converter para o secundário e depois para o terciário. As temperaturas nas zonas de oxidação e redução, superiores a 1173 K, são suficientes para diminuir as espécies primárias do fenol (alcatrão) e craquear termicamente os gases leves como observado na Figura 4.9 para temperatura de 973 K no tempo de simulação de 0 a 20s. Segundo Radmanesh *et al.*, (2006), a quantidade pode ser influenciada por causa da baixa faixa de taxa de fluxo de biomassa neste estudo e a deposição de alcatrão em todas as superfícies frias, o que pode afetar a precisão e repetibilidade da medição de alcatrão.

Figura 4.9 - Fração molar do fenol ($\text{C}_6\text{H}_6\text{O}$) na fase 1 para a temperatura de 973 K



Fonte: Próprio Autor, 2023

5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

5.1 CONCLUSÕES

O modelo matemático do reator de leito fluidizado borbulhante, apresentou resultados satisfatórios. As simulações realizadas, permitiram acompanhar a produção e consumo de espécies provenientes da gaseificação dentro do reator ao longo do tempo de (0 a 20s) de processo. Assim como foi possível analisar o impacto da temperatura no leito fluidizado e sua evolução com o processo.

A pressão foi analisada na escolha da malha, o aumento da pressão, aumenta a taxa de conversão da biomassa em gases de síntese. Isso resulta em uma produção maior de gás por unidade de tempo.

Para garantir que as simulações CFD sejam mais do que apenas exercícios teóricos como unidades bidimensionais, a validação experimental é necessária para facilitar a precisão do modelo. Os resultados do modelo CFD apresentam resultados satisfatórios.

Foi observado que o sistema alcançou a fluidização borbulhante logo nos primeiros segundos de simulação devido à velocidade superficial do gás de $0,38 \text{ m.s}^{-1}$. Foram analisados perfis longitudinais de fração volumétrica e as composições dos gases gerados.

A temperatura de gaseificação é um fator crítico que afeta diretamente a eficiência da gaseificação da biomassa. Em temperaturas mais elevadas, é observado um maior rendimento de gás, provavelmente devido a um conjunto de fatores. Em primeiro lugar, as reações endotérmicas ocorrem de forma mais favorável em temperaturas mais altas, resultando em um maior rendimento de gás. Isso reflete principalmente na composição das espécies CO_2 e O_2 .

Desse modo, as reações de reforma a vapor também são facilitadas em temperaturas mais elevadas, promovendo o craqueamento de alcatrões e hidrocarbonetos mais pesados. Outra razão é que, em temperaturas mais altas, acima de 1073 K não é observada uma melhora significativa no rendimento de gás em função da temperatura, e o incremento de H_2 ocorre de forma mais lenta. Isso se deve à menor importância da reação de deslocamento do gás d'água e à maior dominância das reações de reforma a vapor e da reação de Boudouard. Assim, esses fatores combinados contribuem para o aumento do rendimento de gás em temperaturas mais elevadas.

Logo, é necessário considerar a importância do controle preciso da temperatura durante a operação do gaseificador para garantir a eficiência e a qualidade do produto final, além de minimizar a formação de subprodutos indesejáveis, como alcatrão e emissões poluentes.

Os resultados mostram, que o modelo desenvolvido pode ser usado como uma ferramenta confiável para projetar e otimizar processos de reatores de leito fluidizado

borbulhante. No entanto, para a aplicação em controle de processo real, os modelos matemáticos elaborados para o leito borbulhante necessitam de um longo tempo computacional de processamento, dificultando a realização de numerosos experimentos computacionais.

5.2 Perspectivas para Trabalhos Futuros

1. Realizar os experimentos com a faixa de temperatura estudadas;
2. Aplicar uso de cinéticas da pirólise primária para vários tipos de biomassa;
3. Variar as correlações para sistemas com misturas de diferentes sólidos com velocidade de mínima fluidização mais baixa.

REFERÊNCIAS

AHMAD, A. A., ZAWAWI, N. A., Kasim, F. H., INAYAT, A., & KHASRI, A. **Assessing the gasification performance of biomass: A review on biomass gasification process conditions, optimization and economic evaluation.** *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 53, p. 1333-1347, 2016

ALBRECHT, Friedemann G. *et al.* **A standardized methodology for the techno-economic evaluation of alternative fuels—A case study.** *Fuel*, v. 194, p. 511-526, 2017.

AL-ZAINI, E. O., Al-Kafaji, M. H., Al-Suhail, A. B., Farhan, M. M., **A review of bio-kerosene and biodiesel existed production technologies.** In: AIP Conference Proceedings. AIP Publishing, 2023.

ANDERSON, R. B. **The Fischer-Tropsch synthesis.** New York: Academic Press, 1984

ANAC. **Custos e Despesas Operacionais dos Serviços Aéreos Públicos.** Anuário do Transportes Aéreo (Gráficos e Tabelas -2019). Brasil, 2019

ANAC. **Dados e Estatística - Passageiros. Boletim de Monitoramento.** Brasil, 2022.

ANAC. **Anuário do Transporte Aéreo.** Sumário Executivo. Brasil, 2021a.

ANAC. **Mercado Aéreo. Indicadores do transporte aéreo permanecem sob impacto da pandemia.** Brasil, 2021b.

ANP. Agência Nacional Do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP). Resolução ANP No 778, de 05.04.2019. Estabelece as Especificações Do Querosene de Aviação, Querosenes de Aviação Alternativos e Do Querosene de Aviação C; 2022

ANSYS. **ANSYS Fluent UDF Manual.** Ansys Inc. USA, 2013.

ANSYS. MANUAL, U. D. F. ANSYS FLUENT 12.0. **Theory Guide**, 2009.

BABU, B. V.; CHAURASIA, A. S. **Heat transfer and kinetics in the pyrolysis of shrinking biomass particle.** *Chemical Engineering Science*, v. 59, n. 10, p. 1999-2012, 2004.

BARTHOLIC, D. B. **Improved fluidized catalytic cracking method for residual oil with high conversion.** JP 2000336375-A, May 2 2000, December 5 2000.

BASU, Prabir. **Combustion and gasification in fluidized beds.** CRC press, 2006.

BASU, P. **Design of biomass gasifiers. Biomass gasification, pyrolysis and torrefaction: practical design and theory.** Academic press, 2018a.

BASU, P. **Gasification theory. Biomass gasification, pyrolysis and torrefaction: practical design and theory.** Academic press, 2018b.

BHATIA, S; GUI, M.M.; LEE, K.T.. **Feasibility of edible oil vs. non-edible oil waste edible oil a biodiesel feedstock.** Energy.v.33, p. 1646–1653, 2008.

BELLOTE, A. F. J.; ANDRADE, G. de C.; MOLINARI, H. B. C.; ROCHA, J. D.; SILVA, M. L. B. da; STEINMETZ, R. L. R.; FAVARO, S.P. **Biomassa e sua participação na matriz energética brasileira.** In: ENERGIA limpa e acessível: contribuições da Embrapa. Brasília, DF; Embrapa, 2018. p. 23 – 33.

BETIOLO, C. R.; ROCHA, G. C.; MACHADO, P. R de C. Iniciativas da aviação para redução das emissões de CO₂. Simpósio de Transporte Aéreo, v. 8, n. 2009, p. 401-409, 2009.

BIER, Andreas; BURKHARDT, Ulrike; BOCK, Lisa. **Synoptic control of contrail cirrus life cycles and their modification due to reduced soot number emissions.** Journal of Geophysical Research: Atmospheres, v. 122, n. 21, p. 11,584-11,603, 2017.

BIER, Andreas; BURKHARDT, Ulrike. **Variability in contrail ice nucleation and its dependence on soot number emissions.** Journal of Geophysical Research: Atmospheres, v. 124, n. 6, p. 3384-3400, 2019.

BOEING, EMBRAER, FAPESP, UNICAMP. **Plano de voo para biocombustíveis no Brasil: Plano de ação.** Brasil, 2013.

BOEMER, A.; QI, H.; RENZ, U. **Eulerian simulation of bubble formation at a jet in a two-dimensional fluidized bed.** International Journal of Multiphase Flow, v. 23, n. 5, p. 927-944, 1997.

BRUCE, Ênio Dikran Vasconcelos. **Craqueamento termo-catalítico de ácido mirístico visando à produção de biocombustíveis a partir de biomassa oleaginosa.** Tese (Doutorado). Universidade Federal de Pernambuco. CTG. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, 2017.

BUENTELLO-MONTOYA, D. A., Zhang, X., & Li, J. **The use of gasification solid products as catalysts for tar reforming.** Renewable and Sustainable Energy Reviews, v.107, p.399-412, 2019

CAMPOS, João Pedro Ferreira de. **Implementação, validação e aplicação de um modelo de força de lubrificação em simulações CFD-DEM de um leito fluidizado.**55f. Trabalho de Conclusão de Curso. Departamento de Engenharia Química. Universidade Federal de São Carlos 2020.

CAPAZ, Rafael S. et al. **Mitigating carbon emissions through sustainable aviation fuels: Costs and potential.** Biofuels, Bioproducts and Biorefining, v. 15, n. 2, p. 502-524, 2021.

COLLETTA, Letícia de Oliveira Silva Della. **Estudo do dimensionamento e modelagem em CFD de um gaseificador de leito fluidizado borbulhante**. 2018. 129 p. Tese (Doutorado) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Energia, Universidade Federal de Itajubá, 2018.

CHAUHAN, Vishal *et al.* **A transient Eulerian-Eulerian simulation of bubbling regime hydrodynamics of coal ash particles in fluidized bed using different drag models**. *Advanced Powder Technology*, v. 33, n. 1, p. 103385, 2022.

CHIARAMONTI, David. **Sustainable aviation fuels: the challenge of decarbonization**. *Energy Procedia*, v. 158, p. 1202-1207, 2019.

CLIFT, R.; GRACE, J. R. **Continuous Bubbling And Slugging**. *Fluidization*, p. 73-132, 1985.

CONCONI, Charles Corrêa. **Avaliação físico-química e o potencial de desempenho do farnesano, biodiesel de soja, diesel fóssil e suas misturas por meio da energia de ativação e da correlação com as emissões em motores diesel**. Tese de doutorado. Universidade de São Paulo, 2016.

CORTEZ, Luís Augusto Barbosa (Ed.). **Roteiro para biocombustíveis de aviação sustentáveis para o Brasil: uma rota de voo para biocombustíveis de aviação no Brasil**. Editora Blucher, 2014.

CRANFIELD, R. R.; GELDART, D. **Large particle fluidisation**. *Chemical Engineering Science*, v. 29, n. 4, p. 935-947, 1974.

CREMASCO, Marco Aurélio. **Operações unitárias em sistemas particulados e fluidomecânicos e outros trabalhos**. Editora Blucher, 2014.

DAL'TOÉ, Adrieli Teresinha Odorcik . **Aplicação da teoria de Maxwell-Stefan e análise de correlações em mistura multicomponente com transferência de massa e calor utilizando a abordagem Euler-Lagrange**. Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Florianópolis, 2014

DALLA COSTA, B. O.; LEGNOVERDE, M. S.; LAGO, C.; DECOLATTI, H. P.; QUERINI, C. A. **Sulfonic functionalized SBA-15 catalysts in the gas phase glycerol dehydration. Termal stability and catalyst deactivation**. *Microporous and Mesoporous Materials*. v. 230, p. 66-75, 2016.

DE LASA, Hugo *et al.* **Catalytic steam gasification of biomass: catalysts, thermodynamics and kinetics**. *Chemical reviews*, v. 111, n. 9, p. 5404-5433, 2011.

DOGANIS, R. **The airline business in the 21st century**. Routledge, 2001.

DOS SANTOS SOUZA, T. G., Santos, B. L. P., Santos, A. M. A., de Souza, A. M. G. P., de Melo, J. C., & Wisniewski Jr, A. **Thermal and catalytic micropyrolysis for conversion of cottonseed oil dregs to produce biokerosene**. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, v. 129, p. 21-28, 2018.

DU, Shaohua et al. **Coarse-grained CFD-DEM simulation of coal and biomass co-gasification process** in a fluidized bed reactor: Effects of particle size distribution and operating pressure. *Renewable Energy*, v. 202, p. 483-498, 2023.

DUFOUR, A., Girods, P., Masson, E., Rogaume, Y., & Zoulalian, A. **Synthesis gas production by biomass pyrolysis: effect of reactor temperature on product distribution**. *international journal of hydrogen energy*, v. 34, n. 4, p. 1726-1734, 2009.

EICHLER, Paulo *et al.* **Produção do biometanol via gaseificação de biomassa lignocelulósica**. *Química Nova*, v. 38, p. 828-835, 2015.

ENNES, Juliana. **Governo aponta margem para redução de renováveis na matriz**. Epbr, 2 nov. 2021. Disponível em: <https://epbr.com.br/governo-aponta-margem-para-reducao-de-renovaveis-na-matriz>. Acessado em: 10 de dez. 2022.

ERCAN, Tolga *et al.* **On the front lines of a sustainable transportation fleet: applications of vehicle-to-grid technology for transit and school buses**. *Energies*, v. 9, n. 4, p. 230, 2016

ERI, Qitai; PENG, Jing; ZHAO, Xinjun. **CFD simulation of biomass steam gasification in a fluidized bed based on a multi-composition multi-step kinetic model**. *Applied thermal engineering*, v. 129, p. 1358-1368, 2018.

FARAJI, Mehdi; SAIDI, Majid. **Process simulation and optimization of groundnut shell biomass air gasification for hydrogen-enriched syngas production**. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 47, n. 28, p. 13579-13591, 2022.

FEDE, Pascal; SIMONIN, Olivier; INGRAM, Andrew. **3D numerical simulation of a lab-scale pressurized dense fluidized bed focussing on the effect of the particle-particle restitution coefficient and particle-wall boundary conditions**. *Chemical Engineering Science*, v. 142, p. 215-235, 2016

FENGEL, Dietrich; WEGENER, Gerd (Ed.). **Wood: chemistry, ultrastructure, reactions**. Walter de Gruyter, 2011.

FLECK, J.; WEBSTER, J.; WILLIAMS, R., 1990, **Dynamics of information technology implementation. A reassessment of paradigms and trajectories of development**. *Futures*, 22(6), 618 – 640.

FLEMING, G. G., and I. de LÉPINAY, 2019: **Environmental Trends in Aviation to 2050**. https://www.icao.int/environmentalprotection/Documents/EnvironmentalReports/2019/ENVR_eport2019_pg17-23.pdf. Acessado em: 26 agosto de 2022

FLORY, P. J. **Molecular size distribution in linear condensation polymers**, J. Americ. Chem. Soc., v. 58, n.10, p. 1877-1885, 1936

FONSECA, Noyala Souza Cerqueira. **Obtenção de bioquerosene por pirólise rápida catalítica de biomassa de microalgas**. Dissertação. Universidade Federal da Bahia, 2019.

GAI, Chao *et al.* **Pyrolysis behavior and kinetic study of phenol as tar model compound in micro fluidized bed reactor**. International journal of hydrogen energy, v. 40, n. 25, p. 7956-7964, 2015.

GAO, X., Zhang, Y., Li, B., & Yu, X. **Model development for biomass gasification in an entrained flow gasifier using intrinsic reaction rate submodel**. Energy Conversion and Management, v. 108, p.120-131, 2016

GALINDO, Ana Lisbeth *et al.* **Biomass gasification in a downdraft gasifier with a two-stage air supply: Effect of operating conditions on gas quality**. Biomass and bioenergy, v. 61, p. 236-244, 2014.

GELDART, D. **Types of gas fluidization**, Powder Technology, v. 7, p. 285 – 292, 1973

GIDASPOW, D. **Multiphase Flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Descriptions**. Academic Press, San Diego. 1994.

GÓMEZ-BAREA, A.; LECKNER, B. **Modeling of biomass gasification in fluidized bed**. Progress in Energy and Combustion Science, 36(4):444–509, 2010.

GOTA, Sudhir *et al.* **Decarbonising transport to achieve Paris Agreement targets**. Energy Efficiency, v. 12, n. 2, p. 363-386, 2019.

HAN, Jun; KIM, Heejoon. **The reduction and control technology of tar during biomass gasification/pyrolysis: an overview**. Renewable and sustainable energy reviews, v. 12, n. 2, p. 397-416, 2008.

HARI, Thushara Kandaramath; YAAKOB, Zahira; BINITHA, Narayanan N. **Aviation biofuel from renewable resources: Routes, opportunities and challenges**. Renewable and Sustainable Energy Reviews, v. 42, p. 1234-1244, 2015.

HIRT, Cyril W.; NICHOLS, Billy D. **Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries**. Journal of computational physics, v. 39, n. 1, p. 201-225, 1981

IATA (International Air Transport Association). **Economic Performance of the Airline Industry. Overview**. Montreal, 2021a

IATA (International Air Transport Association). **Economic Performance of the Airline Industry. Industry Statistics**. Montreal, 2021b

ICAO (International Civil Aviation Organization). Overview of trends and developments in international air transport. Montreal, 2008.

IEA, **Biofuel production by country/region and fuel type**, 2016-2022, IEA, Paris <https://www.iea.org/data-and-statistics/charts/biofuel-production-by-country-region-and-fuel-type-2016-2022>. Acessado em: 10 de julho de 2022a.

IEA, **Transport biofuels**, IEA, Paris. <https://www.iea.org/reports/renewable-energy-market-update-2021/transport-biofuels>. Acessado em: 10 de julho de 2022b.

IPCC. **The ocean and cryosphere in a changing climate**. IPCC Special Report on the Ocean and Cryosphere in a Changing Climate, 2019.

IPCC. **Climate change 2022: Mitigation of Climate Change**. IPCC Sixth Assessment Report, 2022.

JI, P., FENG, W., & CHEN, B. **Production of ultrapure hydrogen from biomass gasification with air**. Chemical Engineering Science, v.64, n.3, p.582-592, 2009

ISMAIL, T. M., Abd El-Salam, M., Monteiro, E., & Rouboa, A. **Eulerian–Eulerian CFD model on fluidized bed gasifier using coffee husks as fuel**. Applied Thermal Engineering, v.106, p. 1391-1402, 2016.

KANNARI, Naokatsu *et al.* **Durability studies of limonite ore for catalytic decomposition of phenol as a model biomass tar in a fluidized bed**. Biomass and Bioenergy, v. 107, p. 86-92, 2017.

KARMAKAR, M. K. et al. **Investigation of fuel gas generation in a pilot scale fluidized bed autothermal gasifier using rice husk**. Fuel, v. 111, p. 584-591, 2013.

KAUL, Bal K. HANKS, Patrick L.; ELLIS, Edward S. **Hydroprocessing feedstock containing lipid material to produce transportation fuel**. U.S. Patent Application n. 12/912,103, 2012

KIM, Doohyun; VIOLI, Angela. **Hydrocarbons for the next generation of jet fuel surrogates**. Fuel, v. 228, p. 438-444, 2018.

KHANDELWAL, Bhupendra *et al.* **Hydrogen powered aircraft: The future of air transport**. Progress in Aerospace Sciences, v. 60, p. 45-59, 2018.

KHODABANDEHLOU, Ramin; ASKARIPOUR, Hossein. **Examining the effect of simulation parameters on coal gasification in tapered fluidized bed reactor**. Powder Technology, v. 388, p. 505-516, 2021.

KLÖWER, M., ALLEN, M. R., LEE, D. S., PROUD, S. R., GALLAGHER, L., & Skowron, A. **Quantifying aviation's contribution to global warming.** Environmental Research Letters, v. 16, n. 10, p. 104027, 2021

KOISTINEN, K., UPHAM, P., & BÖGEL, P. Stakeholder signalling and strategic niche management: The case of aviation biokerosene. Journal of Cleaner Production, v. 225, p. 72-81, 2019.

KOU, J., Feng, H., Wei, W., Wang, G., Sun, J., Jin, H., & Guo, L. **Study on the detailed reaction pathway and catalytic mechanism of a Ni/ZrO₂ catalyst for supercritical water gasification of diesel oil.** Fuel, v.312, p.122849, 2022

KOUSOULIDOU, Marina; LONZA, Laura. **Biofuels in aviation: Fuel demand and CO₂ emissions evolution in Europe toward 2030.** Transportation Research Part D: Transport and Environment, v. 46, p. 166-181, 2016

KRÝSA, Pavel; ŠOÓŠ, Miroslav. **Modelling of bubble breakage and coalescence in stirred and sparged bioreactor using the Euler-Lagrange approach.** International Journal of Heat and Mass Transfer, v. 199, p. 123466, 2022.

KULKARNI, M.G. R.; GOPINATH, L.C.; MEHER, A.K.; DALAI. Green Chem. v. 8, p. 1056–1062, 2006.

KUMAR, Umesh; PAUL, Manosh C. **Sensitivity analysis of homogeneous reactions for thermochemical conversion of biomass in a downdraft gasifier.** Renewable Energy, v. 151, p. 332-341, 2020.

KUNII, Daizo; LEVENSPIEL, Octave. **Fluidization engineering.** Butterworth-Heinemann, 1991

KUSHWAH, A.; REINA, T. R.; SHORT, M. **Modelling approaches for biomass gasifiers: A comprehensive overview.** Science of The Total Environment, p. 155243, 2022.

LLAMAS, A., García-Martínez, M. J., Al-Lal, A. M., Canoira, L., & Lapuerta, M. **Biokerosene from coconut and palm kernel oils: Production and properties of their blends with fossil kerosene.** Fuel, v. 102, p. 483-490, 2012.

LECKEL, D. **Diesel production in coal-based high-temperature Fischer-Tropsch plants using fixed bed dry bottom gasification technology.** Fuel Processing Technology. 92: 959-69, 2011

LI, Jishuo et al. **Prediction and optimization of syngas production from steam gasification: Numerical study of operating conditions and biomass composition.** Energy Conversion and Management, v. 236, p. 114077, 2021.

LIU, G.; YAN, B.; CHEN, G. **Technical review on jet fuel production.** Renewable and Sustainable. Energy Reviews. 25: 59–70, 2013.

LIU, Yefei; HINRICHSEN, Olaf. **Study on CFD–PBM turbulence closures based on k– ϵ and Reynolds stress models for heterogeneous bubble column flows**. *Computers & Fluids*, v. 105, p. 91-100, 2014.

LIU, Y., Ma, C., Shi, C., Pan, L., Xie, J., Gong, S., & Zou, J. J. **Synthesis of strained high-energy rocket bio-kerosene via cyclopropanation of myrcene**. *Fuel Processing Technology*, v.201, p. 106339, 2020

LOHA, Chanchal; CHATTOPADHYAY, Himadri; CHATTERJEE, Pradip K. **Advances in mathematical modeling of fluidized bed gasification**. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 40, p. 688-715, 2014.

LU, Liqiang *et al.* **Assessment of different coarse graining strategies to simulate polydisperse gas-solids flow**. *Chemical Engineering Science*, v. 179, p. 53-63, 2018a.

LU, Yujian *et al.* **Multi-scale characteristics and gas-solid interaction among multiple beds in a dual circulating fluidized bed reactor system**. *Chemical Engineering Journal*, v. 385, p. 123715, 2020b.

LUN, C.; SAVAGE, S.; JEFFREY, D.; CHEPURNIY, N. **Kinetic theories for granular flow: Inelastic particles in couette flow and slightly inelastic particles in a general flow field**, *Journal of Fluid Mechanics*, v. 140, p. 223–256, 1984

MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**/Clovis R. Maliska. -2.ed. rev. e ampliada. - [Reimpr.]. - Rio de Janeiro: LTC, 2014

MANU, J.; MADAV, Vasudeva. **Numerical modeling of rice husk gasification in fluidized bed gasifier for sustainable biofuel production**. *Case Studies in Thermal Engineering*, v. 39, p. 102429, 2022

MAZIARKA, Przemyslaw *et al.* **A meta-analysis of thermo-physical and chemical aspects in CFD modelling of pyrolysis of a single wood particle in the thermally thick regime**. *Chemical Engineering Journal*, p. 137088, 2022.

MAYA, Diego Mauricio Yepes *et al.* **Biomass gasification using mixtures of air, saturated steam, and oxygen in a two-stage downdraft gasifier**. *Assessment using a CFD modeling approach*. *Renewable Energy*, v. 177, p. 1014-1030, 2021.

MELO, R. A. P. **Modelagem dinâmica e simulação dos processos de gaseificação e pirólise da biomassa e da combustão do gás natural em reatores a leito fluidizado**. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Pernambuco – UFPE, Recife, 2012

MENDOZA, Mónica Andrea Gualdrón. **Projeto e avaliação computacional do desempenho de um gaseificador de leito fluidizado circulante para obtenção de gás de síntese a partir**

de bagaço de cana de açúcar. 2009. 124 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Universidade Federal de Itajubá, Itajubá, 2009.

MIKHAIL A. Ershov, Vsevolod D. Savelenko, Nikita O. Burov, Uliana A. Makhova, Daria Y. Mukhina, David R. Aleksanyan, Vladimir M. Kapustin, Marina M. Lobashova, Alexander V. Sereda, Tamer M.M. Abdellatief, Ahmad Baroutaji, Mohammad Ali Abdelkareem. **An incorporating innovation and new interactive technology into obtaining sustainable aviation fuels.** *Energy*, p. 128156, 2023.

MONDAL, P., Dang, G. S., & Garg, M. O. **Syngas production through gasification and cleanup for downstream applications—Recent developments.** *Fuel processing technology*, v. 92, n.8, p. 1395-1410, 2011

MONTEIRO, Eliseu et al. **Assessment of the miscanthus gasification in a semi-industrial gasifier using a CFD model.** *Applied Thermal Engineering*, v. 123, p. 448-457, 2017.

MONTEIRO, E., ISMAIL, T. M., RAMOS, A., ABD EL-SALAM, M., BRITO, P., & ROUBOA, A. **Experimental and modeling studies of Portuguese peach stone gasification on an autothermal bubbling fluidized bed pilot plant.** *Energy*, v. 142, p. 862-877, 2018

MORAES, Sandra. **Biomassa e tecnologias de adensamento para aplicação energética.** *Revista IPT: Tecnologia e Inovação*, v. 5, n. 16, 2021.

MORITA, E. S. **Estudo Experimental das Emissões de NOx na Combustão de Carvão Mineral Brasileiro em Leito Fluidizado Rápido.** 2009. 186 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 2009.

MCKENDRY, Peter. **Energy production from biomass (part 3): gasification technologies.** *Bioresource technology*, v. 83, n. 1, p. 55-63, 2002.

MOSES, Clifford A. **Avaliação comparativa de combustíveis semissintéticos para a aviação.** *Contrato*, v. 33415, n. 02-D, pág. 2299, 2008.

NEULING, Ulf; KALTSCHMITT, Martin. **Conversion Routes from Biomass to Biokerosene.** In: *Biokerosene*. Springer, Berlin, Heidelberg, 2018. p. 435-473

NIGMETOVA, Ainur *et al.* **Three-dimensional DEM-CFD simulation of a lab-scale fluidized bed to support the development of two-fluid model approach.** *International Journal of Multiphase Flow*, v. 156, p. 104189, 2022.

NUNN, T.; HOWARD, J.; PETERS, J. (1985). **Product compositions and kinetics in the rapid pyrolysis of sweet gum hardwood.** *Ind. Eng. Chem. Process Dev.* , 24, 836-844.

OKOLIE, J. A., Epelle, E. I., Nanda, S., Castello, D., Dalai, A. K., & Kozinski, J. A. **Modeling and process optimization of hydrothermal gasification for hydrogen production: A comprehensive review**. *The Journal of Supercritical Fluids*, v. 173, p.105199, 2021

OVALLES, Cesar; ROGEL, Estrella; MOIR, Michael. **Method for predicting reactivity of a hydrocarbon-containing feedstock for hydroprocessing**. U.S. Patent Application. 2011.

PANDEY, Bhoopendra; PRAJAPATI, Yogesh K.; SHETH, Pratik N. CFD analysis of the downdraft gasifier using species-transport and discrete phase model. **Fuel**, v. 328, p. 125302, 2022.

PATRA, Tapas Kumar; SHETH, Pratik N. **Biomass gasification models for downdraft gasifier: A state-of-the-art review**. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 50, p. 583-593, 2015.

PEARLSON, Matthew Noah. **A techno-economic and environmental assessment of hydroprocessed renewable distillate fuels**. Tese de Doutorado. Massachusetts Institute of Technology. 2011

PÉCORÁ, A. A. B. **Estudo da Fluidodinâmica de Leitos Fluidizados Circulantes com Injeção de Ar Secundário**. 1995. 258 p. Tese (Doutorado) – Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 1995.

PHILIPPSEN, Caterina Goncalves; VILELA, Antônio Cezar Faria; DALLA ZEN, Leandro. **Fluidized bed modeling applied to the analysis of processes: review and state of the art**. *Journal of Materials Research and Technology*, v. 4, n. 2, p. 208-216, 2015.

PICHLER, H.; SCHULZ, H. **Neuere Erkenntnisse auf dem Gebiet der Synthese von Kohlenwasserstoffen aus CO und H₂**. *Chemie Ingenieur Technik*, v. 42, p. 1162-1174, 1970.

PIRES, Anamaria PP *et al.* **Composição química e propriedades do combustível de combustíveis alternativos para aviação**. *BioResources*, v. 13, n. 2, pág. 2632-2657, 2018.

PUIG-ARNAVAT, M.; BRUNO, J. C.; CORONAS, A., **Review and Analysis of Biomass Gasification Models**, 2010, *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 14, p. 2841-2851, 2010.

QUITETE, C. P. B.; SOUZA, M. V. M., **Remoção de alcatrão de correntes de gaseificação de biomassa: Processos e Catalizadores**. *Quim. Nova*, Vol. 37, No 4, 689-698, 2014.

RADICH, Tony. **The flight paths for biojet fuel**. Washington, DC, v. 20585, 2015.

RADMANESH, R.; CHAOUKI, J.; GUY, C. (2006). **Biomass gasification in a bubbling fluidized bed reactor: experimental and modeling**. *J. AIChE* , 52, 4258-4272.

RENOVABIO.<http://www.mme.gov.br/web/guest/secretarias/petroleo-gas-natural-e-biocombustiveis/acoes-e-programas/programas/renovabio>. Acessado em: 22 de julho de 2022

RIBEIRO, Daniel; CHAVES, Rodrigo; DIAS, Rogério. **Sugar cane diesel: performance and emissions evaluation in médium duty engines**. Disponível em: <<http://www.aea.org.br.pdf>> (Acesso em: out. 2021).

ROCHA, M. H. **Avaliação Técnica de Biorrefinarias para Produção de Biocombustíveis Líquidos e Eletricidade através da Gaseificação de Biomassa**, Itajubá, 285 p. Tese (Doutorado em Conversão de Energia) – Instituto de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá. 2015

ROSAL, A. G. C. **Modelagem e simulação de um gaseificador de biomassa em leito fluidizado borbulhante para produção de energia**. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Pernambuco – UFPE, Recife, 2008.

RODRIGUES, J. P. **Produção de hidrocarbonetos a partir de materiais graxos na presença de catalisadores de metais platínicos e pressão de H₂**. Tese de Doutorado. Brasília, DF: UnB, 2011.

SALEM, Ahmed M.; PAUL, Manosh C. **An integrated kinetic model for downdraft gasifier based on a novel approach that optimises the reduction zone of gasifier**. Biomass and Bioenergy, v. 109, p. 172-181, 2018.

SANTOS, Felipe Daniel Tauk. **Laser induced incandescence soot characterization in farnesane-kerosine wick-fed diffusion flames**. Tese de doutorado. Instituto Tecnológico de Aeronáutica, 2013

SANT'ANNA, Mikele Cândida Souza de. **Simulação Hidrodinâmica de um Gaseificador de Leito Fluidizado Borbulhante**. 137 p. Tese (Doutorado). Universidade Federal de Pernambuco – UFPE, Recife, 2015

SANT'ANNA, Mikele Cândida Sousa et al. Analyzing the fluidization of a gas-sand-biomass mixture using CFD techniques. **Powder Technology**, v. 316, p. 367-372, 2017.

SCHAEFFER, D. **Instability in the evolution equations describing incompressible granular flow**, Journal of Differential Equations, v. 66, p. 19–50, 1987.

SIDEK, F. N.; SAMAD, NAF Abdul; SALEH, S. **Review on effects of gasifying agents, temperature and equivalence ratio in biomass gasification process**. In: IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. IOP Publishing, 2020. p. 012028.

SIMEONE, E.; Siedlecki, M.; Nacken, M.; Heidenreich, S.; de Jong, W. **High temperature gas filtration with ceramic candles and ashes characterization during steam– oxygen blown gasification of biomass**. Fuel, 2013.

SIMELL, Pekka *et al.* **Clean syngas from biomass process development and concept assessment.** Biomass Conversion and Biorefinery, v. 4, n. 4, p. 357-370, 2016

SPEIGHT, James G. **Manual de combustíveis sintéticos: propriedades, processo e desempenho.** Educação McGraw-Hill, 2020.

STAPLES, Mark D.; MALINA, Robert; BARRETT, Steven RH. **The limits of bioenergy for mitigating global life-cycle greenhouse gas emissions from fossil fuels.** Nature Energy, v. 2, n. 2, p. 1-8, 2018.

STREET, J. *et al.* **Gasoline-range hydrocarbon production using biomass derived synthesis gas over Mo/H⁽⁺⁾ZSM-5.** Fuel, Bath, v. 96, p. 239-249, 2012.

SYAMLAL, M.; O'BRIEN, T.J. **Computer simulation of bubbles in a fluidized bed.** A.I.Ch.E. Symposium Series, v.85, p.22–31. 1989

SYAMLAL, M.; ROGERS, W.; O'BRIEN, T. J. MFIX Documentation: Volume 1, Theory Guide. National Technical Information Service, Springfield, VA, 1993.

TAGHIPOUR, Fariborz; ELLIS, Naoko; WONG, Clayton. **Experimental and computational study of gas–solid fluidized bed hydrodynamics.** Chemical engineering science, v. 60, n. 24, p. 6857-6867, 2005.

THOBER, C. W. DE A. **Fluidodinâmica do Leito Fluidizado Circulante para Partículas do Grupo B.** 189 p. Tese (Doutorado) - Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 1995.

TOEI, R.; MATSUNO, R.; TEJIMA, T. **The coalescence of bubbles in the gas-solid fluidized bed.** Kagaku Kogaku, v. 31, p. 1238-1239, 1967.

TOONSEEN, R. Sustainable power from biomass: **Comparison of technologies for centralized or decentralized fuel cell systems.** Tese de Doutorado. Universidade Tecnológica de Delft. Faculty of Mechanical, Maritime and Materials Engineering. Process and Energy Department, Delft:Holanda, 260 pp., 2010.

TRYGGVASON, Grétar; SCARDOVELLI, Ruben; ZALESKI, Stéphane. **Direct numerical simulations of gas–liquid multiphase flows.** Cambridge university press, 2011.

ULLAH, Atta *et al.* **Effect of turbulence modeling on hydrodynamics of a turbulent contact absorber.** Chemical Engineering and Processing-Process Intensification, v. 156, p. 108101, 2020.

VAN LARE, Cornelis Elisabeth Johannes. **Mass transfer in gas fluidized beds: scaling, modeling and particle size influence**. 1991. Tese de Doutorado. Technische Universiteit Eindhoven.

VIVANPATARAKIJ, Supawat; ASSABUMRUNGRAT, Suttichai. **Thermodynamic analysis of combined unit of biomass gasifier and tar steam reformer for hydrogen production and tar removal**. International Journal of Hydrogen Energy, v. 38, n. 10, p. 3930-3936, 2013.

WANG, Shuai et al. **LES-DEM investigation of the time-related solid phase properties and improvements of flow uniformity in a dual-side refeed CFB**. Chemical Engineering Journal, v. 313, p. 858-872, 2017.

WANG, Shuai; LUO, Kun; FAN, Jianren. **CFD-DEM coupled with thermochemical sub-models for biomass gasification: Validation and sensitivity analysis**. Chemical Engineering Science, v. 217, p. 115550, 2020.

WANG, Shuai *et al.* **Multi-scale numerical simulation of fluidized beds: Model applicability assessment**. Particuology, 2022.

WARNECKE, Ragnar. **Gasification of biomass: comparison of fixed bed and fluidized bed gasifier**. Biomass and bioenergy, v. 18, n. 6, p. 489-497, 2000.

WISE, Marshall; MURATORI, Matteo; KYLE, Page. **Biojet fuels and emissions mitigation in aviation: An integrated assessment modeling analysis**. Transportation Research Part D: Transport and Environment, v. 52, p. 244-253, 2017.

WU, Kaiqiao; FRANZIA, Victor; COPPENS, Marc-Olivier. **Dynamic viscoplastic granular flows: A persistent challenge in gas-solid fluidization**. Powder Technology, v. 365, p. 172-185, 2020.

XAVIER, M. C.; FRANCO, T. T. **Batch and continuous culture of hemicellulosic hydrolysate from sugarcane bagasse for lipids production**. Chem. Eng. Trans, v. 38, 2014.

XUE, G. et al. **Gasification of torrefied Miscanthus× giganteus in an air-blown bubbling fluidized bed gasifier**. Bioresource technology, v. 159, p. 397-403, 2014.

YAAKOB, Zahira; HARI, Thushara Kandaramath; BINITHA, Narayanan N. **Aviation biofuel from renewable resources: routes, opportunities and challenges**. Renewable and Sustainable Energy Reviews, v. 42, p. 1234-1244, 2015.

YANG, Wen-ching (Ed.). **Handbook of fluidization and fluid-particle systems**. CRC press, 2003.

Yang, M., Mousavi, S. M., Fatehi, H., & Bai, X. S. **Numerical simulation of biomass gasification in fluidized bed gasifiers.** *Fuel*, v. 337, p. 127104, 2023

YU, Yang *et al.* **Numerical simulation of gas-liquid-solid three-phase flow with the construction of theoretical continuous elements.** *Chemical Engineering Science*, v. 220, p. 115633, 2020.

YUN, S., Wang, H., Tom, M., Ou, F., Orkoulas, G., & Christofides, P. D. **Multiscale CFD modeling of area-selective atomic layer deposition: Application to reactor design and operating condition calculation.** *Coatings*, v.13, n.3, p.558, 2023

ZADRAVEC, Tomas *et al.* The impact of secondary air boundary conditions on CFD results in small-scale wood pellet combustion. ***Fuel***, v. 324, p. 124451, 2022.

ZHAO, Zhigang *et al.* **Hydrodynamic characterization of a tapered gas–solid bed without a gas distributor.** *Powder technology*, v. 256, p. 300-309, 2014.

ZHAO, C., JIANG, E., & CHEN, A. **Volatile production from pyrolysis of cellulose, hemicellulose and lignin.** *Journal of the Energy Institute*, v. 90, n.6, p. 902-913, 2017

ZHANG, Y., Lei, F., & Xiao, Y. **Computational fluid dynamics simulation and parametric study of coal gasification in a circulating fluidized bed reactor.** *Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering*, v.10, n.2, p.307-317, 2015

ZOU, Zheng *et al.* CFD simulations of tapered bubbling/turbulent fluidized beds with/without gas distributor based on the structure-based drag model. ***Chemical Engineering Science***, v. 202, p. 157-168, 2019