

MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA PIRÓLISE DE BIOMASSA EM REATOR DE LEITO FLUIDIZADO

Data de submissão: 08/05/2024

Data de aceite: 01/07/2024

Alysson Dantas Ferreira

Universidade Federal de Campina Grande
Campina Grande -PB
<http://lattes.cnpq.br/3415847633690777>

Suzana Dantas

Universidade Federal de Campina Grande
Campina Grande -PB
<http://lattes.cnpq.br/8371474392585192>

Severino Rodrigues de Farias Neto

Universidade Federal de Campina Grande
Campina Grande -PB
<http://lattes.cnpq.br/5029314237107938>

RESUMO: A pirólise vem se destacando na produção de biogás, bio-óleo e biocarvão. Portanto, é de fundamental importância possuir modelos matemáticos capazes de representar seus fenômenos, de modo a possibilitar a otimização dos processos. Neste contexto, o presente estudo teve como objetivo simular o comportamento da pirólise em um reator de leito fluidizado. Para tanto, empregou-se uma abordagem Euleriana-Lagrangeana em fluidodinâmica computacional (CFD) para descrever o comportamento e a interação das fases. Resolveu-se as equações de massa, quantidade de movimento, energia e

espécie química acoplada com o modelo de partícula DPM. Adotou-se um modelo multicomponente e multiestágio para descrever a cinética da pirólise em dois tipos diferentes de biomassa. Os resultados numéricos obtidos mostraram uma discrepância de 3,4% no estudo da reação de pirólise para a celulose pura e 1,66% para o bagaço de cana-de-açúcar, quando comparado com os dados experimentais relatados na literatura. Portanto, conclui-se que o modelo proposto conseguiu representar de forma satisfatória o comportamento da pirólise de mais de um tipo de biomassa, o que nos permite realizar estudos de otimização nos parâmetros operacionais e geométricos em reatores.

PALAVRAS-CHAVE: CFD, Cana-de-açúcar, Celulose, OpenFoam

MODELING AND SIMULATION OF BIOMASS PYROLYSIS IN FLUIDIZED BED REACTOR

ABSTRACT: Pyrolysis has been gaining prominence in the production of biogas, bio-oil, and biochar. Therefore, it is of fundamental importance to possess mathematical models capable of representing its phenomena, to enable process optimization. In this context,

the present study aimed to simulate the behavior of pyrolysis in a fluidized bed reactor. To do so, an Eulerian-Lagrangian approach in computational fluid dynamics (CFD) was employed to describe the behavior and interaction of the phases. The equations of mass, momentum, energy, and chemical species coupled with the DPM particle model were solved. A multicomponent and multi-stage model was adopted to describe the kinetics of pyrolysis in two different types of biomasses. The numerical results obtained showed a discrepancy of 3.4% in the study of pyrolysis reaction for pure cellulose and 1.66% for sugarcane bagasse when compared to experimental data reported in the literature. Therefore, it is concluded that the proposed model was able to satisfactorily represent the behavior of pyrolysis of more than one type of biomass, allowing for optimization studies in operational and geometric parameters in reactors.

KEYWORDS: CFD, Sugarcane, Cellulose, OpenFoam

INTRODUÇÃO

Existem diversos processos para converter biomassa em biocombustíveis. Entre os principais, a pirólise se destaca como um dos mais favoráveis para a produção de bio-óleo, gerando uma fase gasosa (biogás) e uma fase sólida (biocarvão) como subprodutos (CLISSOLD et al., 2020; MIRANDA et al., 2021). Neste processo, a biomassa é degradada termicamente em uma atmosfera inerte (na ausência de oxigênio) e em temperaturas moderadas. Essa decomposição pode durar de alguns segundos a várias horas (CLISSOLD et al., 2020).

Durante o processo de pirólise, ocorre a quebra das longas e complexas cadeias de hidrocarbonetos em moléculas menores e mais simples, gerando seus produtos. As variáveis que mudam de um processo de pirólise para outro são a taxa de aquecimento da biomassa, influenciada pelo tipo de biomassa e temperatura utilizada, e o tempo de residência da biomassa no reator, manipulado através da vazão do gás inerte e do tamanho das partículas. BENEVIDES (2015) afirma que podemos classificar a pirólise como lenta (ou carbonização), rápida e flash com base na taxa de aquecimento.

Apirólise lenta é caracterizada por longos tempos de residência, taxas de aquecimento da biomassa em torno de 2 °C/s e temperaturas de operação mais baixas (inferiores a 500 °C) do que a pirólise rápida. Neste processo, a formação de biochar é favorecida, tornando-se o principal produto da reação (BRIDGWATER 2012; BROWNSORT 2009; BATISTA JUNIOR 2017). Por outro lado, a pirólise rápida ocorre em altas temperaturas (cerca de 500 °C) com uma taxa de aquecimento na faixa de 10 a 100 °C/s e tempos de residência muito curtos, entre 0,5 e 5 segundos (BROWNSORT 2009). De acordo com BRIDGWATER (2012), o principal produto neste tipo de pirólise é o bio-óleo, com um rendimento de cerca de 50-75%, dependendo da composição da biomassa. No entanto, aumentar o tempo de residência do bio-óleo no reator pode favorecer a formação do biogás através de reações secundárias.

O desenvolvimento de modelos computacionais contribui para a otimização do processo e o desenvolvimento de novos reatores de pirólise, pois permitem analisar e encontrar os melhores parâmetros operacionais e as melhores configurações geométricas do equipamento. Diante disso, muitos estudos utilizam a Fluidodinâmica Computacional (CFD) para modelar a pirólise de biomassa em reatores. Alguns pesquisadores, como PAPADIKIS et al. (2009^a; 2009^b) e FERREIRA et al. (2023) utilizaram o design experimental para analisar o impacto da temperatura, velocidade e diâmetro da partícula na conversão da reação de pirólise da madeira usando um modelo cinético semi-global de duas etapas. HU et al. (2019) utilizaram CFD-DEM para modelar reações de pirólise rápida e investigaram os efeitos da contração e da velocidade superficial do gás. PARK E CHOI (2019) estudaram a influência da temperatura de reação e velocidade do gás na hidrodinâmica, transferência de calor e reações de pirólise. Enquanto isso, YANG et al. (2021) utilizaram o método MP-PIC de abordagem Euler-Lagrange para modelar um reator de leito fluidizado borbulhante tridimensional com o objetivo de estudar a dinâmica física e térmica das bolhas em altas temperaturas.

À luz do exposto, o presente trabalho tem como objetivo propor um modelo matemático capaz de representar o comportamento reacional da pirólise. Para tanto, implementou-se no OpenFOAM um modelo euleriano-lagrangeano e comparou os resultados com dados de literatura para biomassas formadas por bagaço da cana-de-açúcar e da celulose pura.

MODELAGEM MATEMÁTICA

Para modelar a fase gasosa em um escoamento reativo gás-sólido é necessário considerar quatro equações: a equação de continuidade, a equação de quantidade de movimento, a equação de energia e a equação de espécies químicas. Já para modelar o comportamento da partícula, o presente trabalho utilizou a metodologia do Modelo de Partículas Discretas (DPM). Esse descreve o movimento e as interações das partículas. O modelo de esfera macia foi integrado ao DPM para representar as colisões entre partículas e colisões entre partículas e paredes. As equações que modelam ambas as fases serão apresentadas abaixo.

Fase gasosa

A equação de continuidade da fase gasosa pode ser formulada como:

$$\frac{\partial(\alpha_g \rho_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g) = \delta \dot{m}_s \quad (1)$$

onde α_g , ρ_g , e \mathbf{u}_g são, respectivamente, a fração volumétrica, a densidade e a velocidade. $\delta \dot{m}_s$ representa a taxa de consumo ou geração de massa causada pela interação entre a fase gasosa e a fase particulada.

A equação de quantidade de movimento da fase gasosa pode ser escrita por:

$$\frac{\partial(\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g) = -\alpha_g \nabla p_g + \rho_g \alpha_g \mathbf{g} + \nabla \cdot (\alpha_g \boldsymbol{\tau}_g) + \mathbf{F}_{gs} \quad (2)$$

Onde p_g e \mathbf{g} são, respectivamente, a pressão do gás e os termos de aceleração gravitacional, o termo $\boldsymbol{\tau}_g$ representa o tensor de tensão calculado por:

$$\boldsymbol{\tau}_g = (\mu_l + \mu_t)(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3}(\mu_l + \mu_t)(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} \quad (3)$$

onde μ_l e μ_t são a viscosidade laminar e turbulenta, respectivamente. O termo \mathbf{F}_{gs} na Equação 2 representa a troca de momentum entre as fases sólida e a fase gasosa.

A equação de energia da fase gasosa em termos da entalpia pode ser escrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha_g \rho_g h_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g h_g) \\ = \alpha_g \left(\frac{\partial p_g}{\partial t} + \mathbf{u}_g \cdot \nabla p_g \right) - \nabla \cdot (\alpha_g q) + \dot{Q}_D + Q_{gs} + Q_{gw} - \Delta H_{rg} + Q_{rad} \end{aligned} \quad (4)$$

onde h_g e ΔH_{rg} são, respectivamente, a entalpia e o calor da reação química. h_g é calculado pela adição da entalpia de cada espécie envolvida:

$$h_g = \sum_{k=1}^{N_k} h_g^k Y_g^k = \sum_{k=1}^{N_k} Y_g^k \left(\int_{T_0}^{T_g} C_p^k dT + \Delta h_g^k \right) \quad (5)$$

onde N_k é o número de espécies químicas presentes na fase gasosa. T_0 , T_g , C_p^k e Δh_g^k são, respectivamente, a temperatura de referência, a temperatura da fase gasosa, o calor específico da espécie k e o calor da reação. Q_{gs} e Q_{gw} da Equação 4 representam os termos de transferência de calor entre gás-sólido e gás-parede, respectivamente. A transferência de calor convectivo entre a parede e a fase gasosa (Q_{gw}) é calculada por:

$$Q_{gw} = h_{gw} A_{gw} (T_w - T_g) \quad (6)$$

onde T_w e A_{gw} são, respectivamente, a temperatura e a área superficial da parede. \dot{Q}_D é a difusão entálpica calculada por:

$$\dot{Q}_D = \sum_{k=1}^{N_k} \nabla \cdot (\alpha_g h_g^k \rho_g D_{if,g}^k \nabla Y_g^k) \quad (7)$$

O fluxo de calor q é calculado por:

$$q = \lambda_g \nabla T_g \quad (8)$$

onde o termo λ_g é a condutividade térmica da fase gasosa. O termo Q_{gs} na Equação 4 representa a troca de calor entre a fase gasosa e a fase sólida.

A equação de transporte das espécies gasosas pode ser formulada como:

$$\frac{\partial(\alpha_g \rho_g Y_g^k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g Y_g^k) = \nabla(\alpha_g \rho_g D_{if,g}^k \nabla Y_g^k) + \dot{m}_{\text{react},g}^k + \dot{m}_{\text{react},gs}^k \quad (9)$$

Esta equação é resolvida com base na espécie química k , e cada elemento computacional é somado para obter a mudança de espécies na mistura gasosa. $D_{if,g}^k$ é a difusividade de massa turbulenta e $\dot{m}_{\text{react},g}^k$ modela as reações químicas da fase gasosa para cada espécie química. Este termo é calculado por:

$$\dot{m}_{\text{react},g}^k = \psi_i C_i \quad (10)$$

onde k_i e C_i são respectivamente a constante de taxa de reação e a concentração do componente i . A constante de taxa de reação será detalhada na seção 2.4. O termo $\dot{m}_{\text{react},gs}^k$ na Equação 9 representa a taxa de consumo ou geração da espécie k causada pela interação entre a fase gasosa e a fase particulada.

Fase sólida

A movimentação da partícula i de massa m_i e volume V_i em um sistema é calculada de acordo com a segunda lei do movimento de Newton, dada por:

$$m_i \frac{d\mathbf{u}_{s,i}}{dt} = m_i \frac{d^2 \xi_i}{dt^2} = f_i^{g-s} + f_i^{s-w} + f_i^{grav} \quad (11)$$

Onde $\mathbf{u}_{s,i}$ é a velocidade, ξ_i é a posição da partícula i , f_i^{g-s} representa as forças atuantes nas partículas devido à interação com fluidos, f_i^{grav} é a força gravitacional na partícula i e f_i^{s-w} é o termo de colisão partícula-parede.

O momento angular de uma dada partícula i é calculado por:

$$\mathbf{I}_i \frac{d\omega_i}{dt} = \mathbf{M}_i^{g-s} \quad (12)$$

onde \mathbf{M}_i^{g-s} é o torque causado pelo efeito fluido-partícula. \mathbf{I}_i é o momento de inércia, que para uma partícula esférica de raio r_i é calculado por $\mathbf{I}_i = \frac{2}{5} m_i r_i^2$.

Cada partícula assume ter uma temperatura uniforme, e assim a conservação de energia da partícula i em um sistema é calculada por:

$$m_i c_{p,i} \frac{dT_i}{dt} = Q_{gs} + Q_{rad} + \Delta H_{rs} \quad (13)$$

onde $c_{p,i}$ e T_i são a capacidade térmica e a temperatura da partícula i , Q_{gs} é o calor líquido pela interação entre a fase gasosa e a fase de partículas, calculado por:

$$Q_{gs} = \frac{\lambda_g Nu_i}{d_p} A_i (T_g - T_s) \quad (14)$$

onde d_p e A_i são o diâmetro e a área superficial da partícula. Nu_i é o número de Nusselt da partícula calculado por:

$$Nu_i = 2 + 0.6 Re_p^{0.5} Pr^{0.33} \quad (15)$$

Onde Pr e Re_p são os números de Prandtl e Reynolds da partícula, respectivamente. ΔH_{rs} é o calor de reação da fase sólida, e Q_{rad} é o efeito da radiação na partícula, calculado por:

$$Q_{rad} = \sigma \epsilon_s A_s (T_{b,local}^4 - T_s^4) \quad (16)$$

onde σ e ϵ_s são a constante de Stefan-Boltzmann e a emissividade da partícula.

A Equação 17 calcula a massa de cada partícula i em um sistema:

$$\frac{dm_i}{dt} = \sum \Omega_i \quad (17)$$

Ω_i representa o termo fonte de massa que pode aumentar ou diminuir devido à reação química da fase sólida.

A Equação 18 calcula a composição de cada partícula i presente em um sistema:

$$\frac{d(m_i Y_{i,k})}{dt} = \sum \Omega_{i,k} \quad (18)$$

$\Omega_{i,k}$ representa o termo fonte das espécies químicas presentes nas partículas que podem aumentar ou diminuir devido a uma reação química.

Interação gás-partícula

O modelo de arrasto desempenha um papel essencial na caracterização de um sistema gás-partícula ao quantificar a transferência de quantidade de movimento entre as fases. Esse modelo é de fundamental importância para entender a complexa dinâmica destes sistemas. A força de arrasto de uma única partícula i é calculado da seguinte forma:

$$\mathbf{f}_i^{g-s} = \mathbf{f}_{D,i} = \frac{V_p D_p}{1 - \alpha_g} (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_{s,i}) \quad (19)$$

O modelo de arrasto de Gidaspow é uma abordagem amplamente utilizada para modelagem gás-sólido. Ele combina a correlação de Ergun, adequada para sistemas densos (ERGUN E ORNING, 1949), com a correlação de Wen-Yu, utilizada para sistemas diluídos (YANG et al., 2021). Isso o torna apropriado para uma ampla gama de regimes de fluxo gás-sólido. O modelo de Gidaspow é escrito da seguinte forma:

$$D_p = \begin{cases} \frac{150(1 - \alpha_g)^2 \mu_g}{\alpha_g d_p^2} + \frac{1.75 \rho_g (1 - \alpha_g) |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_{s,i}|}{d_p}, \alpha_g \leq 0.8 \\ \frac{3 \alpha_g \rho_g (1 - \alpha_g) |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_{s,i}|}{4} C_D \alpha_g^{-2.65}, \alpha_g > 0.8 \end{cases} \quad (20)$$

onde

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_s} (1 + 0.15 Re_s^{0.687}), Re_s < 1000 \\ 0.44, Re_s \geq 1000 \end{cases} \quad (21)$$

A força gravitacional atuando na partícula é dada por:

$$f_i^{grav} = \frac{\mathbf{g}(\rho_g - \rho_s)}{\rho_g} \quad (22)$$

onde ρ_s é a densidade da partícula i e \mathbf{g} é a aceleração da gravidade.

Cinética

O processo de pirólise rápida de biomassa em reatores envolve numerosas reações elementares (BASHIR et al., 2021; FOONG et al., 2020), o que resulta na formação de vários produtos químicos, como compostos de ácidos orgânicos, cetonas e fenóis. Compostos gasosos, como CH₄, CO₂, CO, H₂ e outros hidrocarbonetos de gás de síntese, também são detectados (MADUSKAR et al., 2018). No entanto, devido à complexidade das reações químicas envolvidas, a cinética detalhada da reação e os mecanismos fundamentais de decomposição ainda estão sob pesquisa, e as informações sobre as espécies intermediárias ainda não são completamente compreendidas (YANG et al., 2021).

Nas simulações de CFD, as reações químicas que ocorrem durante a pirólise são tipicamente simplificadas em um conjunto de reações principais que podem capturar efetivamente o comportamento geral do processo. Esquemas de devolatilização global obtidos a partir de experimentos de análise termogravimétrica (TGA) são frequentemente usados para obter esses modelos cinéticos, permitindo estudos de simulação rápida de pirólise de biomassa (XIONG et al., 2014).

A Figura 1 apresenta a cinética multicomponente e multiestágio usada neste trabalho. Esse mecanismo foi proposto por KOUFOPANOS et al. (1989), DI BLASI (1994), WARD E BRASLAW (1985) e MILLER E BELLAN (1997) e já foi estudada anteriormente, no qual foram obtidos resultados satisfatórios (PARK et al., 2019; CLISSOLD et al., 2020).

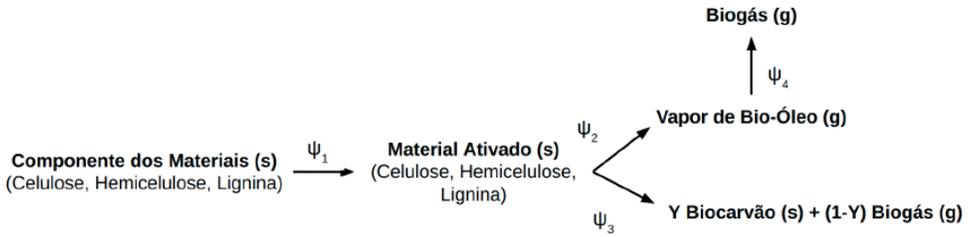


Figura 1 - Mecanismo de reação multicomponente e multiestágio.

Este modelo correlaciona a taxa de pirólise da biomassa com sua composição, conforme mostrado abaixo:

$$\text{Biomassa} = Y_1 \text{Celulose} + Y_2 \text{Hemicelulose} + Y_3 \text{Lignina} \quad (23)$$

Neste modelo, a taxa de reação da biomassa é considerada a soma das taxas de reação de seus principais componentes: celulose, hemicelulose e lignina. Portanto, o peso de cada componente contribui para a formação da biomassa virgem (XUE et al., 2012). Essa suposição considera que as interações potenciais entre os componentes da biomassa têm um efeito negligenciável no decorrer da pirólise. Assim, qualquer matéria-prima de biomassa pode ser modelada com base no conhecimento inicial da composição de celulose, hemicelulose e lignina.

Conforme mostrado na Figura 1, os produtos são agrupados em biocarvão, biogás e bio-óleo. Y representa a taxa de formação para o componente de biocarvão. A lei de Arrhenius é usada para calcular a taxa da reação química e pode ser formulada da seguinte forma:

$$\psi_i = \theta_i \exp\left(\frac{-E_i}{RT}\right) \quad (24)$$

onde R é a constante universal dos gases, θ_i é o fator pré-exponencial e E_i é a energia de ativação. A Tabela 1 detalha os parâmetros cinéticos da reação.

Componentes	Reação	Y of ψ_3	θ_i [s ⁻¹]	E_i [J/mol]	ΔH_i [J/kg]
Celulose ^[26]	$\psi_{c,1}$	-	2.80×10^{19}	2.424×10^5	0
	$\psi_{c,2}$	-	3.28×10^{14}	1.965×10^5	2.55×10^5
	$\psi_{c,3}$	(y_c) 0.35	1.30×10^{10}	1.505×10^5	-2.55×10^5
Hemicelulose ^[23]	$\psi_{h,1}$	-	2.10×10^{16}	1.867×10^5	0
	$\psi_{h,2}$	-	8.75×10^{15}	2.024×10^5	2.55×10^5
	$\psi_{h,3}$	(y_h) 0.60	2.60×10^{11}	1.457×10^5	-2.55×10^5
Lignina ^[23]	$\psi_{l,1}$	-	9.60×10^8	1.076×10^5	0
	$\psi_{l,2}$	-	1.50×10^9	1.438×10^5	2.55×10^5
	$\psi_{l,3}$	(y_l) 0.75	7.70×10^6	1.114×10^5	-2.55×10^5
Bio-óleo ^[27]	$\psi_{t,4}$	-	4.28×10^6	1.080×10^5	-4.2×10^4

Tabela 1 - Arrhenius parameters for the multicomponent scheme.

De acordo com DI BLASI (1994), KOUFOPANOS et al. (1991) e CURTIS E MILLER (1988), as entalpias das reações foram obtidas a partir de medidas realizadas apenas para a celulose; no entanto, esses valores também são usados para o cálculo da hemicelulose e da lignina. DI BLASI (1994) afirma que a primeira reação (ψ_1) da biomassa virgem para os componentes ativos tem uma liberação de calor muito pequena, que pode ser negligenciada. KOUFOPANOS et al. (1991) relatam que a reação de formação de alcatrão (ψ_2) endotérmica. Tanto a formação de carvão quanto de gás (ψ_3) quanto a craqueamento secundário do vapor de bio-óleo (ψ_4) são exotérmicos.

CONSIDERAÇÕES PARA A SIMULAÇÃO

O presente trabalho foi baseado em um estudo conduzido por XUE et al. (2012) e SUTTIBAK (2017), que investigaram experimentalmente a pirólise de celulose pura e bagaço de cana-de-açúcar em um reator fluidizado borbulhante, respectivamente. Para acelerar as simulações sem comprometer a qualidade dos resultados, o leito de partículas foi simplificado e o modelo de partícula única foi adotado, conforme realizado por FERREIRA et al. (2023) e PAPADIKIS et al. (2009^b). Esses estudos demonstraram que essa abordagem de modelagem fornece uma estimativa razoável do progresso da reação de pirólise, produzindo conversões precisas e rendimentos de produtos se as condições de contorno forem ajustadas para o modelo usado. Além disso, a geometria proposta por XUE et al. (2012) e SUTTIBAK (2017) foi simplificada para um formato pseudo-2D com uma espessura de 7 mm. Essa simplificação foi baseada no trabalho de LI et al. (2012), que concluiu que a espessura do reator fluidizado deve ser pelo menos 12,3 vezes o tamanho da partícula para negligenciar o efeito da parede e garantir que não influencie no comportamento das partículas. Essa consideração foi validada por HU et al. (2019), XUE et al. (2012) e FERREIRA et al. (2023).

A precisão das simulações de CFD é influenciada pelo número de elementos da malha computacional. Um maior número de elementos leva a uma melhor precisão, mas também aumenta os custos computacionais e o tempo de cálculo (VERSTEEG E MALALASEKERA, 2007). Em simulações de CFD que utilizam a abordagem Euleriana-Lagrangeana resolvida pelo método DPM, o tamanho do elemento da malha deve considerar o tamanho da partícula, em que ela deve ser pequena o suficiente para obter uma boa precisão e grande o suficiente para garantir uma variação temporal e espacial adequada das frações de partículas sólidas (HU et al., 2019). Diante disso, é recomendável seguir as sugestões de estudos anteriores ao determinar os tamanhos adequados de malha e partícula (HU et al., 2019).

No trabalho realizado por BOYCE et al. (2015), recomendou-se uma razão (S_c/d_p) entre 3 e 4 para obter o melhor resultado entre dados experimentais e resultados numéricos em problemas de leito fluidizado. Assim, no presente estudo, seguimos essas recomendações e adotamos uma razão (S_c/d_p) de 3. Conseqüentemente, criamos uma malha computacional de 20x4x176 elementos nas direções x, y e z. A Figura 2 apresenta o domínio estudado e o resultado da malha computacional usadas neste trabalho.

Os modelos estudados neste trabalho foram implementados no OpenFOAM-v2012, um programa gratuito e de código aberto. Aproveitando-se dessa característica, modificou-se o *solver reactingParcelFoam*, que é usado para resolver problemas transientes com escoamento compressível, turbulento, com reação química, com partícula multifásica e modelos de filme de superfície, adicionando em seu código o modelo DPM, de modo a considerar os efeitos da fração volumétrica das partículas na fase contínua, além de inserir as colisões entre as partículas e entre as partículas paredes. Além disso, submodelos com a cinética de reação de pirólise heterogênea foram implementados no código-fonte do *software*.

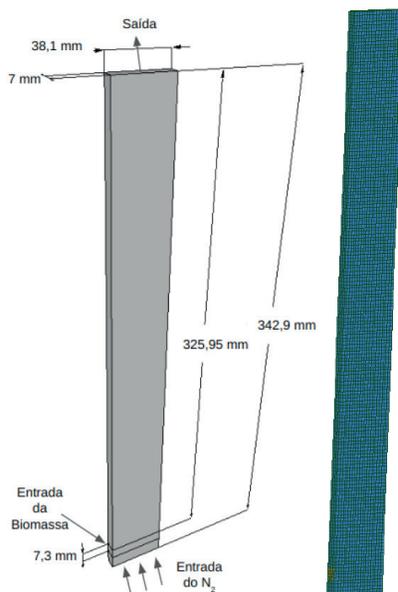


Figura 2 - Geometria e malha do leito fluidizado.

O presente estudo realizou duas simulações, cada uma com uma partícula de biomassa diferente: celulose pura e bagaço de cana-de-açúcar. As composições de cada biomassa estão apresentadas na Tabela 2.

	Celulose Pura*	Cana-de-Açúcar**
Celulose	1.0	0.43
Hemicelulose	0.0	0.34
Lignina	0.0	0.23

*XUE et al. (2012), **SUTTIBAK (2017)

Tabela 2. Composição das biomassas estudadas.

Nas simulações, uma única partícula de biomassa foi considerada e inserida no centro do reator, a uma altura de 0,01905 m, com uma velocidade de 0 m/s e uma temperatura de 303 K. O fluxo de entrada consistia apenas de nitrogênio, que entrava pela base do reator a uma temperatura de 773 K e uma velocidade fixa. O valor da velocidade foi ajustado para cada cenário com base no tempo de residência da fase gasosa obtido a partir dos experimentos relatados por XUE et al. (2012) (0,18m/s) e SUTTIBAK (2017) (0,21 m/s). A saída do reator foi definida à pressão atmosférica (101325 Pa), e as paredes foram assumidas como não deslizantes e adiabáticas. Inicialmente, o reator estava preenchido por N₂ estagnado a uma temperatura de 303 K.

A partícula possui uma condutividade térmica e calor específico calculados proporcionalmente com base na fração de massa sólida (celulose, hemicelulose, lignina e carvão). Quando a biomassa é aquecida, ela passa por um processo chamado pirólise, que é a quebra de seus componentes em celulose ativa, hemicelulose ativa e lignina ativa. Esses compostos então produzem biocarvão, bio-óleo e biogás. As propriedades do N₂, dos gases de pirólise e da biomassa podem ser encontradas na Tabela 3.

	ρ [kg/m ³]	d_p	μ [Pa s]	λ [W/mK]	C_p [J/kgK]
Celulose Pura*	400	5e-5	-	0,3	2300
Cana-de-açúcar**	120	5e-4	-	0,1	2468
Biocarvão*	2333	-	-	0,1	1100
N ₂ *	Gás ideal	-	3e-5	3.58e-2	1121
Biogás*	Gás ideal	-	3e-5	2.577e-2	2500
Bio-óleo*	Gás ideal	-	3e-5	2.577e-2	1100

*YANG et al. (2021), **Almeida (2008)

Tabela 3. Parâmetros da simulação.

Para completar cada simulação, um tempo físico de 10 segundos foi simulado usando um passo de tempo variável e um número de Courant fixo de 0,5. As simulações foram conduzidas em um computador equipado com um processador Intel Core i9-12900k e 32 GB de RAM, utilizando quatro núcleos de processamento. O processo todo levou aproximadamente 4 horas para ser concluído.

RESULTADOS

A velocidade do nitrogênio foi ajustada de modo que o tempo de residência da fase gasosa fosse igual ao de um reator contendo um leito de partículas inertes. Para esse fim, o estudo conduzido por XUE et al. (2012) foi usado como referência, e uma velocidade de 0,18 m/s foi obtida. Posteriormente, foi simulada a pirólise de uma única partícula de celulose pura. O resultado das reações para a formação de bio-óleo, biogás, biocarvão e biomassa não reagida é apresentado na Figura 3. Ela também inclui os resultados do trabalho experimental de XUE et al. (2012) e as simulações realizadas por XUE et al. (2012) e YANG et al. (2021).

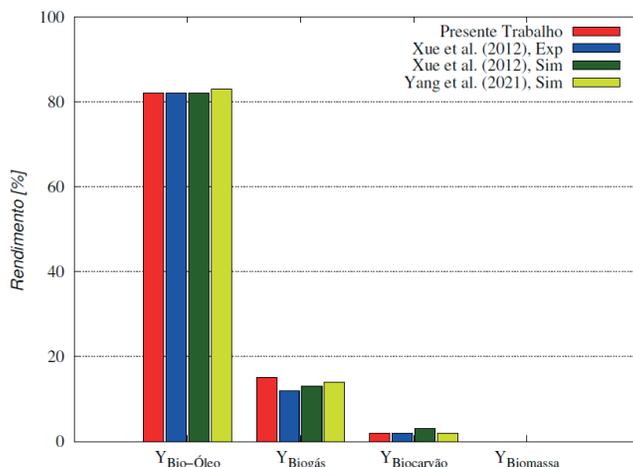


Figura 3 - Comportamento do rendimento da reação de pirólise da celulose pura.

Ao comparar os resultados obtidos da simulação com os dados relatados na literatura, observa-se que os rendimentos das reações para cada produto e para a biomassa apresentaram boa concordância. Os rendimentos de vapor de bio-óleo e de biocarvão mostraram comportamentos quase idênticos aos rendimentos experimentais. Os resultados na Tabela 4 permitem uma análise mais detalhada dos valores obtidos.

Celulose Pura				
	Simulado	XUE et al. (2012) Exp.	XUE et al. (2012) Sim	YANG et al. (2021) Sim.
$Y_{\text{bio-óleo}}$	82.50%	82.10%	82.20%	83.20%
$Y_{\text{biogás}}$	15.36%	12.40%	13.90%	14.90%
$Y_{\text{biocarvão}}$	2.14%	2.20%	3.30%	2.70%
Y_{biomassa}	0.00%	0.00%	0.50%	0.00%

Tabela 4 - Rendimento da reação de pirólise da celulose pura.

Pode-se observar na Tabela 4 que os rendimentos de vapor de bio-óleo, biocarvão e biomassa não reagida foram praticamente os mesmos encontrados nos experimentos conduzidos por XUE et al. (2012). O rendimento relativo do biogás apresentou uma diferença de quase 3% em relação aos dados experimentais e de 0,46% em relação ao valor relatado por YANG et al. (2021). Ao somar as frações de massa dos dados experimentais, obtém-se um valor de 96,7%, o que pode ser atribuído a erros experimentais ou imprecisões nas medições. Se tais erros ocorreram no medidor de biogás, os resultados de rendimento seriam muito próximos.

Para estudar o comportamento do modelo cinético multicomponente e multiestágio em diferentes tipos de biomassa com frações variadas de celulose, hemicelulose e lignina, foi realizada uma simulação de pirólise na biomassa de bagaço de cana-de-açúcar. Da mesma forma que para a celulose pura, a velocidade de nitrogênio foi ajustada para que o tempo de residência do gás corresponda ao tempo de residência de um reator contendo um leito de partículas inerte. Portanto, os resultados de SUTTIBAK (2017) foram utilizados para obter a velocidade média do gás dentro do reator. Assim, a condição de contorno de velocidade de entrada imposta foi ajustada para 0,21 m/s. Com base nisso, a simulação do bagaço de cana-de-açúcar foi realizada, e os resultados para os rendimentos de bio-óleo, biogás e biocarvão são mostrados na Figura 4.

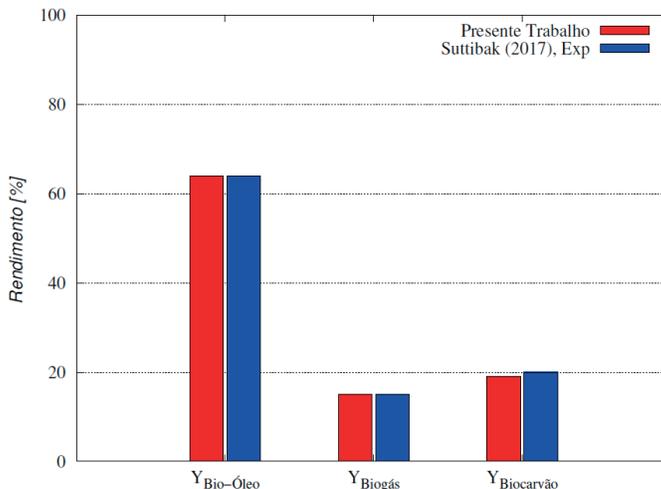


Figura 4 - Comportamento dos rendimentos da reação de pirólise da cana-de-açúcar.

Após comparar os resultados da simulação de pirólise de cana-de-açúcar com os dados existentes na literatura, torna-se evidente que os rendimentos obtidos na simulação estão em bom acordo com os dados experimentais de SUTTIBAK (2017). Para analisar as discrepâncias nos resultados de forma mais quantitativa, foi construída a Tabela 5.

Ao analisar a Tabela 5, pode-se observar que os rendimentos de bio-óleo, biogás e biocarvão estão próximos aos dados experimentais obtidos por SUTTIBAK (2017). O rendimento do vapor de bio-óleo apresentou uma diferença de 0,27% em relação aos dados experimentais, o rendimento de gás mostrou uma diferença de 0,56%, e o rendimento de carvão apresentou uma diferença de 0,83%.

	Simulado	SUTTIBAK (2017)
$Y_{\text{bio-óleo}}$	64.77%	64.50%
$Y_{\text{biogás}}$	15.86%	15.30%
$Y_{\text{biocarvão}}$	19.37%	20.20%

Tabela 5 - Rendimento da reação de pirólise da cana-de-açúcar.

CONCLUSÃO

Com base na simulação numérica, as seguintes conclusões podem ser tiradas:

- O modelo de transferência de massa, quantidade de movimento, energia e espécie química acoplados com o modelo da fase discreta (DPM) em conjunto com a cinética multicomponente e multiestágio conseguiram representar bem o comportamento da pirólise de diferentes tipos de biomassa em um leito fluidizado. Os resultados foram confrontados e validados com dados experimentais e de literatura.

- b. O modelo proposto por este trabalho possibilitará um maior entendimento dos fenômenos envolvidos na pirólise, permitirá a realização de estudos de otimização dos parâmetros operacionais e uma avaliação e melhorias dos reatores existentes.

REFERÊNCIAS

- Almeida, M. B. B. d. (2008). Bio-óleo a partir da pirólise rápida, térmica ou catalítica, da palha da cana-de-açúcar e seu co-processamento com gas/óleo em craqueamento catalítico. **Disertação de Mestrado**, UFRJ.
- BASHIR, M.; YU, X.; HASSAN, M.; MAKKAWI, Y. Modeling and performance analysis of biomass fast pyrolysis in a solar-thermal reactor. **ACS Sustainable Chemistry & Engineering**, v. 5, p. 3795–3807, 2017.
- BATISTA JUNIOR, R. Pirólise da borra de café: Cinética química e operação em leito fixo. **Dissertação de Mestrado**, UFTM, 2017.
- BENEVIDES, L. C. Pirólise de secagem de laranja: Análise cinética dos estágios de secagem e devolatização. **Dissertação de Mestrado**, UFES, 2015.
- BOYCE, C.; HOLLAND, D.; DENNIS, J.; SCOTT, S. Limitations on fluid grid sizing for using volume-averaged fluid equation in discrete element models of fluidized beds. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 54, p. 10684-10697, 2015.
- BRIDGWATER, A. Review of fast pyrolysis of biomass and product upgrading. **Biomass and Bioenergy**, v. 38, p. 68–94, 2012.
- BROWNSORT, P. Biomass Pyrolysis Processes: Performance parameters and their influence on Biochar system boundaries. **Tese de Doutorado**, Biochar Research Center, 2009.
- CLISSOLD, J.; JALALIFAR, S.; SALEHI, F.; ABBASSI, R.; GHODRAT, M. Fluidisation characteristics and inter-phase heat transfer on product yields in bubbling fluidised bed reactor. **Fuel**, v. 273, p. 117791, 2020.
- CURTIS L. J.; MILLER, D. J. Transport model with radiative heat transfer for rapid cellulose pyrolysis. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 27, p. 1775–1783, 1988
- DI BLASI, C. Numerical simulation of cellulose pyrolysis. **Biomass and Bioenergy**, v. 7, p. 87–98, 1994.
- ERGUN S.; ORNING, A. A. Fluid flow through randomly packed columns and fluidized beds. **Industrial & Engineering Chemistry**, v. 41, p. 1179–1184, 1949.
- FERREIRA, A. D.; FERREIRA, S. D.; DE FARIAS NETO, S. R. Study of the influence of operational parameters on biomass conversion in a pyrolysis reactor via cfd. **Korean Journal of Chemical Engineering**, v. 40, p. 2787–2799, 2023.

FOONG, S. Y.; LIEW, R. K.; YANG, Y.; CHENG, Y. W.; YEK, P. N. Y.; WAN MAHARI, W. A.; LEE, X. Y.; HAN, C. S.; VO, D. V. N.; VAN LE, Q.; AGHBASHLO, M.; TABATABAEI, M.; SONNE, C.; PENG, W.; LAM, S. S. Valorization of biomass waste to engineered activated biochar by microwave pyrolysis: Progress, challenges, and future directions. **Chemical Engineering Journal**, v. 389, p. 124401, 2020.

HU, C.; LUO, K.; WANG, S.; SUN, L.; FAN, J. Computational Fluid Dynamics/Discrete Element Method Investigation on the Biomass Fast Pyrolysis: The Influences of Shrinkage Patterns and Operating Parameters. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 58, p. 1404–1416, 2019.

KOUFOPANOS, C. A.; LUCCHESI, A.; MASCHIO, G. Kinetic modelling of the pyrolysis of biomass and biomass components. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 67, p. 75–84, 1989.

KOUFOPANOS, C. A.; PAPAYANNAKOS, N.; MASCHIO, G.; LUCCHESI, A. Modelling of the pyrolysis of biomass particles. Studies on kinetics, thermal and heat transfer effects. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 69, p. 907–915, 1991.

LI, T.; GOPALAKRISHNAN, P.; GARG, R.; SHAHNAME, M. CFD–DEM study of effect of bed thickness for bubbling fluidized beds. **Particuology**, v. 10, p. 532–541, 2012.

MADUSKAR, S.; FACAS, G. G.; PAPAGEORGIOU, C.; WILLIAMS, C. L.; DAUENHAUER, P. J. Five rules for measuring biomass pyrolysis rates: pulse-heated analysis of solid reaction kinetics of lignocellulosic biomass. **ACS Sustainable Chemistry & Engineering**, v. 6, p. 1387–1399, 2018.

MILLER R.; BELLAN, J. A generalized biomass pyrolysis model based on superimposed cellulose, hemicellulose and lignin kinetics. **Combustion Science and Technology**, v. 126, p. 97–137, 1997.

MIRANDA, T. N.; MOTTA, L. I.; MACIEL FILHO, R.; MACIEL, W. M. R. Sugarcane bagasse pyrolysis: A review of operating conditions and products properties. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 149, p. 111394, 2021.

PAPADIKIS, K.; GERHAUSER, H.; BRIDGWATER, A.; GU, S. Cfd modelling of the fast pyrolysis of an in-flight cellulosic particle subjected to convective heat transfer. **Biomass and Bioenergy**, v. 3, p. 97–107, 2009^a.

PAPADIKIS, K.; GU, S.; BRIDGWATER, A. Cfd modelling of the fast pyrolysis of biomass in fluidised bed reactors: Modelling the impact of biomass shrinkage. **Chemical Engineering Journal**, v. 149, p. 417–427, 2009^b.

PARK, H. C.; CHOI, H. S. Fast pyrolysis of biomass in a spouted bed reactor: Hydrodynamics, heat transfer and chemical reaction. **Renewable Energy**, v. 143, p. 1268–1284, 2019.

SUTTIBAK, S. Influence of reaction temperature on yields of bio-oil from fast pyrolysis of sugarcane residues. **Engineering and Applied Science Research**, v. 44, p. 142–147, 2017.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. An introduction to computational fluid dynamics. **Harlow: Pearson Prentice Hall**, 2007.

WARD S.; BRASLAW, J. Experimental weight loss kinetics of wood pyrolysis under vacuum. **Combustion and Flame**, v. 61, p. 261–269, 1985.

XIONG, Q.; ARAMIDEH, S.; KONG, S.C. Assessment of devolatilization schemes in predicting product yields of biomass fast pyrolysis. **Environmental Progress & Sustainable Energy**, v. 33, p. 756–761, 2014.

XUE, Q.; DALLUGE, D.; HEINDEL, T.; FOX, R.; BROWN, R. Experimental validation and cfd modeling study of biomass fast pyrolysis in fluidized bed reactors. **Fuel**, v. 97, p. 757–769, 2012.

YANG, S.; WAN, Z.; WANG, S.; WANG, H. Reactive mp-pic investigation of heat and mass transfer behaviors during the biomass pyrolysis in a fluidized bed reactor. **Journal of Environmental Chemical Engineering**, v. 9, p. 105047, 2021.

YANG, S.; DONG, R.; DU, Y.; WANG, S.; WANG, H. Numerical study of the biomass pyrolysis process in a spouted bed reactor through computational fluid dynamics. **Energy**, v. 214, p. 118839, 2021.