

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE A REDAÇÃO FINAL DA
TESE DEFENDIDA POR Ademar Hakuo Ushima
E APROVADA PELA
COMISSÃO JULGADORA EM 21 / 06 / 1996.
Leonardo Goldstein Jr
ORIENTADOR

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA**

Modelagem e Simulação de Pirólise e Secagem de Biomassa em um Gaseificador de Leito Movente Contracorrente

Volume I

Autor: **Ademar Hakuo Ushima**
Orientador: **Leonardo Goldstein Jr.**

Campinas, 1996
S.P. - Brasil

7914878
**Us3m
v.1
38225/BC**

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA TÉRMICA E FLUIDOS**

Modelagem e Simulação de Pirólise e Secagem de Biomassa em um Gaseificador de Leito Movente Contracorrente

Autor: Ademar Hakuo Ushima

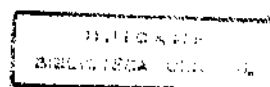
Orientador: Leonardo Goldstein Jr.

Curso: Engenharia Mecânica

Área de Concentração: Térmica e Fluidos

**Dissertação de mestrado apresentado à comissão de Pós Graduação da
Faculdade de Engenharia Mecânica, como requisito para a obtenção do título de
Mestre em Engenharia Mecânica.**

**Campinas, 1996
S.P. - Brasil**



UNIDADE	78C
N.º CHAMADA:	
V. 01	
TOM	38225
PG	229/99
PRE	R\$ 11,00
DATA	10/08/99
N.º CPD	

CM-00125554-1

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

U3m
2v. Ushima, Ademar Hakuo
Modelagem e simulação de pirólise e secagem de
biomassa em um gaseificador de leito movente
contracorrente / Ademar Hakuo Ushima.--Campinas,
SP: [s.n.], 1996.

Orientador: Leonardo Goldstein Jr.
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica.

1. Pirólise – Simulação (Computadores). 2.
Gaseificadores – Simulação (Computadores) 3. Energia
da biomassa – Simulação (Computadores). I. Ushima,
Ademar Hakuo. II. Universidade Estadual de Campinas.
Faculdade de Engenharia Mecânica. III. Título.

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA TÉRMICA E FLUIDOS**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

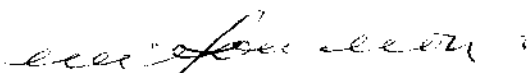
**Modelagem e Simulação de Pirólise e
Secagem de Biomassa em um Gaseificador de
Leito Movente Contracorrente**

Autor: **Ademar Hakuo Ushima**

Orientador: **Leonardo Goldstein Jr.**



**Prof. Dr. Leonardo Goldstein Jr, Presidente
Universidade Estadual de Campinas**



**Prof. Dr. Milton Mori
Universidade Estadual de Campinas**



**Prof. Dr. Electo Eduardo Silva Lora
Universidade Estadual de Campinas**

Campinas, 21 de junho de 1996

Dedicatória

Dedico este trabalho à minha família e a toda a equipe do Agrupamento de Engenharia Térmica do IPT que, direta ou indiretamente, garantiram o suporte necessário à sua realização.

Agradecimentos

Este trabalho não poderia ser terminado sem a ajuda de diversas pessoas às quais presto minha homenagem:

Ao meu orientador, Prof. Leonardo Goldstein Jr, que me mostrou os caminhos a serem seguidos e fez uma revisão criteriosa e cuidadosa deste trabalho.

Ao Prof. Márcio de Souza Santos que iniciou os trabalhos de orientação e desenvolveu o programa de simulação que serviu de base para esta Tese.

Ao Eng. Francisco Domingues de Sousa que sempre me incentivou e esteve à disposição para discutir temas e dúvidas relevantes ao trabalho.

À Enga Maria Emília Rezende que gentilmente colocou à minha disposição artigos extremamente importantes na área de pirólise de biomassa.

A todos os colegas de trabalho, em especial à equipe da Seção de Combustão Industrial, que ajudaram, de forma direta e indireta, na conclusão deste trabalho.

***O ser humano atinge a plenitude quando
deixa de se lamuriar do que teve de fazer
e passa a se orgulhar do que fez.***

SUMÁRIO

Volume I

DEDICATÓRIA.	i
AGRADECIMENTOS	i
SUMÁRIO	iii
LISTA DE FIGURAS	vi
LISTA DE TABELAS	ix
NOMENCLATURA	xi
RESUMO	xvii
ABSTRACT	xix
1. INTRODUÇÃO.	1
2. ESTADO DA ARTE DA PIRÓLISE DE BIOMASSA.	3
2.1. Avaliação de Propriedades e Mecanismos de Transporte Relevantes à Pirólise de uma Partícula de Biomassa.	4
2.2. Revisão de Modelos de Pirólise Encontrados na Literatura.	9
2.3. Modelagem de Gaseificadores.	20
2.3.1. Revisão de Modelos de Gaseificadores.	20
2.3.2. Considerações sobre o Modelo de Souza Santos.	25
3. MODELAGEM DO GASEIFICADOR DE LEITO MÓVEL CONTRACORRENTE.	27
3.1. Introdução.	27
3.2. Equações Fundamentais.	34

3.2.1. Equação da Continuidade.	34
3.2.2. Equação da Conservação de Energia.	37
3.3. Modelagem da Fase Sólida.	39
3.3.1. Modelagem da Fase Sólida nas Regiões de Combustão e Gaseificação.	39
3.3.2. Modelagem da Fase Sólida nas Regiões de Pirólise, Secagem e Aquecimento.	53
3.4. Modelagem da Fase Gasosa.	65
3.4.1. Hipóteses Simplificadoras.	65
3.4.2. Equação de Conservação de Espécies Químicas Aplicada à Fase Gasosa.	66
3.4.3. Equação da Energia Aplicada à Fase Gasosa.	67
4. MODELAGEM DAS REAÇÕES QUÍMICAS	72
4.1. Reações Químicas Consideradas.	72
4.2. Reações Heterogêneas.	73
4.2.1. Determinação da Molaridade dos Elementos Constituintes do Carbono Fixo e do Alcatrão.	78
4.2.2. Cálculo das Taxas de Reação de Combustão e Gaseificação de Cavacos.	81
4.2.3. A Constante de Velocidade das Reações Heterogêneas, k_j .	87
4.3. Reações Homogêneas.	91
5. RESOLUÇÃO DO SISTEMA DE EQUAÇÕES DO MODELO.	95
5.1. Consolidação das Equações da Modelagem.	95
5.2. Métodos Numéricos de Resolução dos Sistemas Apresentados.	98
5.2.1. Sistema 1 : Regiões de Combustão e Gaseificação.	98
5.2.2. Sistema 2 : Regiões de Pirólise, Secagem e Aquecimento.	100
5.3. Diagrama de Blocos do Programa de Simulação.	103
6. APRESENTAÇÃO E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS.	106
6.1. Descrição do Dispositivo Experimental.	106
6.2. Condições de Operação.	108
6.3. Apresentação e Avaliação dos Resultados Obtidos.	110
6.3.1. Perfis de Temperatura.	111
6.3.2. Descargas e Concentrações dos Componentes.	118

6.3.3. Taxas de Reação.	127
6.3.4. Rendimento Térmico do Gaseificador.	130
6.4. Influência das Propriedades e das Condições do Combustível Alimentado	
sobre o Desempenho do Gaseificador.	134
6.4.1. Efeito da Espessura do Cavaco Alimentado.	135
6.4.2. Influência da Umidade do Cavaco.	137
6.4.3. Influência da Condutividade Térmica do Carbono Fixo.	139
6.4.4. Influência da Entalpia de Reação de Pirólise.	142
6.5. Influência do Número de Passos de Integração ao Longo da Espessura	
e Altura das Partículas nas Regiões de Pirólise, Secagem e Aquecimento.	144
7. CONCLUSÕES E SUGESTÕES.	147
7.1. Conclusões.	147
7.2. Sugestões para Outros Trabalhos.	151
BIBLIOGRAFIA	153

Lista de Figuras

FIGURA	TÍTULO	PÁG.
2.1	Variação de temperatura do centro da placa com o tempo.	12
2.2	Efeito da condutividade do carvão na velocidade de pirólise.	14
2.3	Curvas de variação da capacidade energética com a temperatura	15
2.4	Influência do resfriamento e da velocidade de aquecimento nos perfis de temperatura obtidos por Brown.	18
2.5	Esquema de pirólise de biomassa adotado por Souza Santos.	22
3.1	Desenho do gaseificador ensaiado.	28
3.2	Representação das regiões e fases existentes em um gaseificador de leito movente contracorrente.	30
3.3	Representação da frente de secagem e da região de pirólise no interior de um cavaco contínuo.	31
3.4	Representação esquemática de uma placa de carbono fixo descendo nas regiões de gaseificação e combustão.	33
3.5	Representação de fluxos de massa entrando e saindo de um elemento de volume DV do reator.	34
5.1	Diagrama de blocos do programa de simulação de gaseificador	

	de leito movente contracorrente.	104
6.1	Foto do gaseificador ensaiado.	107
6.2	Perfis de temperatura obtidos ao longo do leito do gaseificador. Resultado experimental e de simulação.	113
6.3	Perfis de temperatura das fases sólida e gasosa na região localizada imediatamente acima da base do leito. Resultado de simulação.	114
6.4	Perfis de temperatura no interior dos cavacos, nas regiões de pirólise, secagem e aquecimento. Resultado de simulação.	116
6.5	Composição da fase gasosa ao longo da altura do gaseificador. Resultado experimental.	119
6.6	Composição da fase gasosa ao longo da altura do leito(base seca, livre de alcatrão). Resultado de simulação.	120
6.7	Concentração de componentes na fase gasosa em região próxima à base do leito. Resultado de simulação.	121
6.8	Descargas dos principais componentes da fase gasosa ao longo da altura do gaseificador. Resultado de simulação.	125
6.9	Taxas de reações heterogêneas. Resultado de simulação.	128
6.10	Taxas de reações heterogêneas nas regiões de gaseificação e combustão. Resultado de simulação.	129
6.11	Taxas de reações homogêneas na base do gaseificador. Resultado de simulação.	130
6.12	Temperatura da parede externa do gaseificador.	

	Resultado de simulação.	133
6.13	Potência dissipada pela parede externa do gaseificador, acumulada a partir da base . Resultado de simulação.	134
6.14	Influência da espessura de partícula nos perfis de temperatura.	136
6.15	Influência da umidade do cavaco sobre os perfis de temperatura ao longo do gaseificador.	138
6.16	Influência da condutividade térmica do carbono fixo no perfil de temperatura do gaseificador.	141
6.17	Taxas de reação de pirólise obtidas para duas condutividades de carbono fixo.	142
6.18	Sensibilidade do modelo ao valor da entalpia de reação de pirólise.	143
6.19	Influência da variação do número de passos nos perfis de temperatura das regiões de pirólise, secagem e aquecimento.	145

Lista de Tabelas

TABELA	TÍTULO	PÁG.
2.1	Tempos característicos estimados para partículas de biomassa.	5
2.2	Valores dos parâmetros empregados no cálculo dos tempos característicos.	6
4.1	Identificação dos componentes considerados no modelo.	73
4.2	Rendimento de produtos de pirólise de cavacos de Eucalyptus obtidos em retorta metálica.	78
4.3	Composição do produto de pirólise empregado na simulação, obtida a partir de ensaio experimental em retorta.	80
4.4	Análise imediata do cavaco de Eucalyptus (% massa, b.s.).	80
4.5	Análise elementar do cavaco de Eucalyptus (% massa, b.s.).	80
4.6	Análise elementar do carbono fixo obtido no ensaio de pirólise.	81
4.7	Coeficientes molares calculados para o carbono fixo.	81
4.8	Parâmetros para a determinação das constantes de velocidade das reações heterogêneas.	87
4.9	Parâmetros de cálculo das constantes de equilíbrio das reações heterogêneas.	91

4.10 Parâmetros para cálculo das constantes das reações homogêneas.	94
6.1 Análise imediata do material alimentado.	109
6.2 Análise elementar do material alimentado.	109
6.3 Densidade do cavaco de madeira empregado no ensaio de gaseificação.	109
6.4 Valor médio dos parâmetros operacionais do ensaio experimental.	110
6.5 Perfil de temperatura registrado ao longo do leito no ensaio experimental.	112
6.6 Posicionamento dos nós internos aos cavacos.	117
6.7 Composição da fase gasosa ao longo do leito. Resultado experimental.	118
6.8 Composição da fase gasosa no topo do leito, base seca. Resultados experimental e simulado.	122
6.9 Composição da fase gasosa no topo do leito, base úmida. Resultado de simulação.	124
6.10 Descrição das regiões identificadas na Fig. 6.8.	125
6.11 Poder calorífico superior da madeira e dos produtos de pirólise.	131
6.12 Rendimentos obtidos.	132

NOMENCLATURA

SÍMBOLOS LATINOS :

a	fração de partícula não reagida,	
a_i	coeficiente estequiométrico do componente i ,	
A	área,	$[m^2]$
A_T	área total da seção transversal do gaseificador,	$[m^2]$
A_{Ts}	área da seção transversal do gaseificador ocupada pela fase sólida,	$[m^2]$
B_0	permeabilidade da biomassa,	$[m^2]$
C	concentração molar,	$[kmol\ m^{-3}]$
c_p	calor específico,	$[J\ kg^{-1}K^{-1}]$
D	diâmetro,	$[m]$
D_F	difusividade,	$[m^2s^{-1}]$
$D_{fg,i}$	difusividade do componente i na camada limite em torno das partículas,	$[m^2s^{-1}]$
$D_{fc,i}$	difusividade do componente i na camada de carvão,	$[m^2s^{-1}]$
$D_{fn,i}$	difusividade do componente i no núcleo não reagido,	$[m^2s^{-1}]$

e	espessura de refratário,	[m]
E	energia de ativação,	[kJ kmol ⁻¹]
E^*	capacidade energética	[J kg ⁻¹ K ⁻¹]
F	descarga	[kg s ⁻¹]
H	entalpia específica,	[J kg ⁻¹]
$\bar{H}_i$	entalpia específica molar do componente i,	[J kmol ⁻¹]
$\bar{H}_i^0$	entalpia de formação molar do componente i,	[J kmol ⁻¹]
$\hat{H}_i$	entalpia específica mássica,	[J kg ⁻¹]
H_p	entalpia de reação de pirólise,	[J kg ⁻¹]
g	aceleração da gravidade,	[m s ⁻²]
h	coeficiente de película de transferência de calor por convecção,	[J m ⁻² s ⁻¹ K ⁻¹]
h_{lv}	entalpia latente de vaporização da água,	[J kg ⁻¹]
j	fluxo mássico difusivo,	[kg m ⁻² s ⁻¹]
J	fluxo molar difusivo,	[kmol m ⁻² s ⁻¹]
K	condutividade térmica,	[J m ⁻¹ s ⁻¹ K ⁻¹]
k	constante de velocidade de reação química,	[A unidade depende do tipo de reação]
k_o	fator de frequência de reação química,	[A unidade depende do tipo de reação]
$K_{eq,j}$	constante de equilíbrio da reação j,	[A unidade depende do tipo de reação]
k_{TM}	coeficiente de película de transferência de massa,	[m s ⁻¹]
L	comprimento característico,	[m]
M	massa,	[kg]
M_i	massa molecular do componente i,	[kg kmol ⁻¹]
n	vetor fluxo mássico,	[kg m ⁻² s ⁻¹]
n_i	vetor fluxo mássico do componente i,	[kg m ⁻² s ⁻¹]
N_i	vetor fluxo molar do componente i,	[kmol m ⁻² s ⁻¹]
n_p	número de partícula,	
N_{Sh}	número de Sherwood,	
N_{Th}	coeficiente de Thiele,	

p	pressão,	[Pa]
Py	número de pirólise,	
q	vetor fluxo de calor por condução,	[J m ⁻² s ⁻¹]
q_r	fluxo de calor por radiação,	[J m ⁻² s ⁻¹]
Q	calor trocado entre fases,	[J]
r_i	taxa de formação da espécie química i ,	[kg m ⁻³ s ⁻¹]
r_j	taxa da reação j ,	[kg m ⁻³ s ⁻¹]
R	constante gases ideais, 8314	[kgm ² s ² kmol ⁻¹ K ⁻¹]
Re	número de Reynolds,	
R_i	taxa da reação de formação de componente i ,	[kmol m ⁻³ s ⁻¹]
R_j	taxa da reação j ,	[kmol m ⁻³ s ⁻¹]
Sc	número de Schmidt,	
Sh	número de Sherwood,	
T	temperatura,	[K]
T_B	temperatura de saturação da umidade na biomassa,	[K]
t	tempo,	[s]
U	umidade,	[kgágua/kgbiom.]
$\bar{V}$	volume específico molar,	[m ³ kmol ⁻¹]
W	fluxo mássico,	[kg m ⁻² s ⁻¹]
w_i	fração mássica do componente i ,	
x_i	fração molar do componente i na fase sólida,	
y_i	fração molar componente i na fase gasosa,	
x	ordenada x ,	[m]
y	ordenada y ,	[m]
y_p	espessura inicial do cavaco,	[m]
y_s	metade da espessura inicial do cavaco,	[m]
z	ordenada z ,	[m]
Z_L	altura total do leito,	[m]
ZFCG	altura da cota da região de fim de gaseificação	[m]

SÍMBOLOS GREGOS :

α	difusividade térmica,	$[\text{m}^2 \text{s}^{-1}]$
β	fração mássica	
χ	espessura adimensional,	
ε	fração de vazios ou emissividade,	
ϕ	relação de fluxos de energia,	
γ	peso específico,	$[\text{N m}^{-3}]$
τ	fluxo de quantidade de movimento,	$[\text{N m}^{-2}]$
φ	fator de correção de coeficiente de película,	
μ	viscosidade dinâmica,	$[\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}]$
$\nu_{i,j}$	coeficiente estequiométrico do componente i na reação j,	
θ	concentração molar,	
ρ	densidade,	$[\text{kg m}^{-3}]$
σ	constante de Stefan-Boltzmann; $5,669 \cdot 10^{-8}$	$[\text{J m}^{-2} \text{s}^{-1} \text{K}^{-4}]$
σ_i	desvio padrão da concentração do componente i	
ζ_m	fator de atenuação da reação heterogênea	$[\text{s m}^{-2}]$

SUBSCRITO :

a	ambiente
alc	alcatrão
b	superfície
bs	base seca
bu	base úmida
c	carbono fixo
cz	cinza
eq	equilíbrio
g	gás
het	heterogêneo
hom	homogêneo
i	componente
gp	gás de pirólise
gv	vapor d'água
j	reação química
k	passo ao longo da espessura de partícula
L	leito
m	madeira
ms	madeira seca
mu	madeira úmida
O	condição inicial
p	partícula ou pirólise
pe	parede externa do gaseificador
pi	parede interna do gaseificador
r	refratário

s	sólido, superfície ou seco
tc	tiço
Tg	transversal da fase gasosa
Ts	transversal da fase sólida
u	úmido
v	vapor d'água
vol	volátil
x	componente vetorial na direção x
y	componente vetorial na direção y
z	componente vetorial na direção z

SOBRESCRITO :

- molar
- ^ mássico
- | passo ao longo da altura do gaseificador

Resumo

USHIMA, Ademar Hakuo. *Modelagem e Simulação de Pirólise e Secagem de Biomassa em um Gaseificador de Leito Movente Contracorrente*. Campinas - Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, 1996, 247 p., Dissertação de Mestrado.

Trata-se de um trabalho de modelagem e simulação bidimensional das etapas de aquecimento, secagem e pirólise de uma partícula de biomassa, aplicado a um modelo de simulação unidimensional de um gaseificador de leito movente contracorrente, operando em regime permanente, baseado em modelo existente na literatura.

Os modelos de aquecimento, secagem, pirólise, gaseificação e combustão empregados são desenvolvidos a partir das equações fundamentais de conservação de massa e energia e os resultados da simulação são comparados com dados experimentais.

A partir dos perfis de temperatura e concentração simulados ao longo da altura do leito do gaseificador e da espessura da partícula de biomassa, pode-se identificar e determinar as extensões das diversas regiões existentes no interior do gaseificador. A altura das regiões de pirólise, secagem e aquecimento, normalmente desprezada ou ocupando uma extensão reduzida nos modelos unidimensionais, apresenta uma extensão expressiva no modelo bidimensional,

correspondente a cerca de 3/4 da altura do leito. A influência de alguns parâmetros operacionais característicos, como a umidade e o diâmetro das partículas, e de propriedades, como a condutividade térmica do carvão e a entalpia de reação da pirólise, no desempenho do gaseificador, também foi avaliada.

Os perfis de temperatura e de concentração dos componentes combustíveis na fase gasosa, bem como o rendimento global a frio obtidos na simulação ficaram abaixo dos valores experimentais correspondentes. Uma análise das possíveis causas das diferenças observadas é apresentada.

Palavras Chave

- Modelagem de Pirólise, Pirólise de Biomassa, Modelagem de Gaseificador

Abstract.

USHIMA, Ademar Hakuo. *Modelagem e Simulação de Pirólise e Secagem de Biomassa em um Gaseificador de Leito Movente Contracorrente*. Campinas -: Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, 1996, 249 p., Dissertação de Mestrado.

In this work is proposed a two-dimensional model to simulate the heating, drying and pyrolysis stages of a biomass particle, which was applied to a steady-state, one-dimensional simulation program of a countercurrent fixed bed gasifier, available in the literature.

The models developed for the heating, drying, pyrolysis, gasification and combustion stages were based on the basic equations of mass and energy conservation. The obtained results were compared with experimental data.

From the temperature and concentration profiles simulated along the gasifier bed height and through the particle it was possible to identify and determine the extension of these regions in the gasifier. The height occupied by the heating, drying and pyrolysis stages, which is usually assumed as negligible or with a reduced extension in the one dimensional models, is shown to be much larger in the two-dimensional model, corresponding to about three-fourths of the bed height. The influence on the gasifier performance of some characteristic operational parameters, such as the biomass particle moisture and diameter, and of properties, as the charcoal thermal conductivity and the enthalpy of pyrolysis was evaluated.

The temperature and composition profiles, as well as the overall cold efficiency obtained from the simulation, presented results under the available experimental data. An analysis of these results is presented.

Key Words

-Pyrolysis Modelling, Biomass Pyrolysis, Gasifier Modelling.

Capítulo 1

1. INTRODUÇÃO.

O objetivo principal deste trabalho foi desenvolver um modelo bidimensional de pirólise, secagem e aquecimento para partículas de biomassa, tendo em vista sua utilização em um programa de simulação unidimensional de um gaseificador de leito movente contracorrente existente na literatura. O programa escolhido, desenvolvido por SOUZA E SANTOS (1985), também sofreu modificações na parte de combustão e gaseificação de resíduos carbonosos, tendo-se introduzido a difusão de calor por condução na direção axial do gaseificador. Procurou-se ainda apresentar de forma detalhada os balanços de massa e energia empregados no modelo, partindo-se das equações fundamentais, bem como as correlações utilizadas no cálculo de parâmetros e propriedades.

A utilização de um modelo de pirólise e secagem mais preciso na simulação de gaseificadores e combustores de biomassa assume importância porque cerca de 60% da entalpia de combustão de uma biomassa está contida nos produtos de pirólise. Apesar disso a grande maioria dos programas de simulação de gaseificadores e combustores encontrada na literatura emprega modelos simplificados de pirólise e secagem, dando um tratamento isotérmico para as partículas e considerando-as controladas por uma reação química. Estas simplificações se adequam, em geral, a partículas de dimensões pequenas, com

diâmetros abaixo de 0,0005 m. Para estas partículas as taxas de transferência de calor e de massa no seu interior não são determinantes na definição das taxas globais de pirólise e secagem.

O emprego de um modelo de secagem e pirólise mais detalhado é particularmente importante na modelagem de incineradores de resíduos sólidos, onde a obtenção de perfis precisos de temperatura e concentração ao longo das partículas e do comprimento dos fornos é importante na previsão de taxas de formação, decomposição e emissão de compostos poluentes.

O teste de validação do programa de simulação desenvolvido é feito através de confrontação dos resultados de simulação com dados experimentais obtidos em gaseificador contracorrente de escala piloto, desenvolvido nas dependências do Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo S.A. - IPT.

Capítulo 2

2. ESTADO DA ARTE DA PIRÓLISE DE BIOMASSA.

A pesquisa bibliográfica sobre pirólise de biomassa, mesmo entre os trabalhos mais recentes, resulta em um número muito grande de trabalhos com caráter essencialmente experimental, que se resumem em apresentar as composições e os rendimentos dos produtos de pirólise, empregando os mais variados tipos de biomassa e de equipamento de pirólise, sem a preocupação de interpretar os fenômenos envolvidos. Isto provavelmente se deve à complexidade dos fenômenos e reações envolvidos na pirólise de uma partícula de biomassa.

A primeira tentativa de modelar a pirólise de biomassa foi em 1946, quando BAMFORD, CRANK E MALAN apresentaram um modelo simplificado de pirólise, que consistiu em um balanço de energia numa peça de madeira submetida à pirólise. A partir de então surgiram alguns trabalhos que procuraram incorporar a este modelo um número maior de fenômenos, como o resfriamento provocado pela passagem de produtos de pirólise e secagem através de uma matriz de carvão, e dados e propriedades determinados de forma mais precisa, como a entalpia e a constante de reação de pirólise, as condutividades do carvão vegetal e da madeira, e outros.

Os modelos mais recentes ainda apresentam um grau de simplificação elevado na modelagem de algumas etapas importantes da pirólise, como a modelagem das reações de decomposição dos produtos condensáveis dentro e fora das partículas. Isto se deve à extrema complexidade destas reações e à enorme variedade de produtos gerados. Alguns modelos procuram dividir a biomassa seca em seus constituintes principais como celulose, hemi-celulose e lignina - cada um com uma cinética própria de decomposição - mas não chegam a considerar a grande variedade de componentes formados (que podem ultrapassar a casa de centenas) normalmente agrupando-os em produtos como alcatrão, gases incondensáveis, licor pirolenhoso e carbono fixo.

2.1. Avaliação de Propriedades e Mecanismos de Transporte Relevantes à Pirólise de uma Partícula de Biomassa.

A taxa de pirólise de uma partícula de biomassa depende de parâmetros físicos e químicos da partícula, da interação com o meio que a envolve e da cinética da reação de pirólise.

CHAN, KELBON E KRIEGER (1985) propuseram, a partir de uma análise baseada em tempos característicos, apresentados na Tabela 2.1, os parâmetros e os mecanismos de transporte relevantes à pirólise de uma partícula de biomassa. O tempo característico, apesar de não levar em conta o gradiente da força principal envolvida, dá uma noção do tempo necessário para determinado fenômeno ocorrer, podendo servir de orientação na determinação das resistências predominantes .

As expressões empregadas no cálculo dos tempos característicos são apresentados na primeira coluna da Tabela 2.1.

Tabela 2.1 Tempos característicos estimados para partículas de biomassa.

MECANISMOS AVALIADOS	TEMPO CARACTERÍSTICO (s)			
	Comprimento característico da partícula			
	(L=10 ⁻⁵ m)		(L=10 ⁻² m)	
	T=500 K	T=1100 K	T=500 K	T=1100 K
Difusão, L^2/D_f	10 ⁻⁴	0,3x10 ⁻⁴	10 ²	0,3x10 ²
Transporte de massa por convecção, $\mu L^2/pB_0$	10 ⁻⁶	0,6x10 ⁻⁶	1	0,6
Transporte de calor por convecção, $L(\rho c_p)_s/h$	10 ⁻¹	>10 ⁻¹	10 ²	>10 ²
Transporte de calor por condução, $L^2(\rho c_p)_s/K$	10 ⁻⁴	>10 ⁻⁴	10 ²	>10 ²
Cinética de pirólise, $(k_0 \cdot \exp(-E/RT))^*$	10 ⁶	10 ⁻²	10 ⁶	10 ⁻²

onde : L : comprimento característico da partícula,

D_f : difusividade do gás através da partícula,

μ : viscosidade dinâmica do gás,

p : pressão no interior das partículas,

B_0 : permeabilidade da fase sólida,

$(\rho c_p)_s$: entalpia de produtos de pirólise sólidos,

$(\rho c_p)_g$: entalpia de produtos de pirólise gasosos,

K : condutividade térmica da fase sólida;

h : coeficiente de película de transferência de calor,

k_0 : constante da reação de pirólise,

E : energia de ativação da reação de pirólise.

Os valores empregados no cálculo dos tempos característicos estão na Tabela 2.2.

Tabela 2.2 Valores dos parâmetros empregados no cálculo dos tempos característicos.

D_f	$10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$	K	$10^{-1} \text{ J m}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ K}^{-1}$
μ	10^{-5} Pa s	h	$10 \text{ J m}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ K}^{-1}$
p	10^5 Pa	k_0	10^8 s^{-1}
B_0	10^{-14} m^2	E	140 kJ mol^{-1}
$(\rho c_p)_s$	$10^5 \text{ J m}^{-3} \text{ K}^{-1}$	$(\rho c_p)_g$	$10^3 \text{ J m}^{-3} \text{ K}^{-1}$

O comprimento de 10^{-5} m corresponde à dimensão característica dos poros existentes em madeiras e o de 10^{-2} m à de partículas de biomassa normalmente utilizadas em equipamentos de pirólise e gaseificação e de combustão em grelha.

Para partículas com dimensões da ordem de 10^{-2} m pode-se observar, na Tabela 2.1, que o tempo característico do transporte difusivo é muito maior que o do transporte convectivo, indicando que o transporte difusivo neste caso, por ser muito mais lento que o convectivo, pode ser desprezado.

O transporte de calor por convecção e condução e a cinética de reação são variáveis dependentes e as que apresentam tempos característicos maiores são as limitantes. Observe-se que, para partículas com dimensão característica de 10^{-2} m

e temperaturas da ordem de 1100 K, temperatura normalmente observada em gaseificadores e fornos de pirólise de biomassa, os tempos característicos obtidos para as transferências de calor por condução e convecção são muito maiores que o tempo característico obtido para a reação de pirólise, indicando que, nestas condições, os fatores limitantes devem ser os mecanismos de transferência de calor e não a cinética da pirólise.

CHAN, KELBON E KRIEGER (1985) consideraram ainda que a corrente gasosa de produtos de pirólise, ao atravessar uma matriz de carvão, entrava rapidamente em equilíbrio térmico com a fase sólida. Esta hipótese foi justificada a partir do tempo de residência do gás de pirólise no interior de uma partícula com espessuras de 10^{-2} m, que foi da ordem de 1 s, e do tempo característico da transferência de calor por convecção no interior dos poros desta mesma partícula, com diâmetros da ordem de 10^{-5} m, em torno de 10^{-1} s. Desta forma o gás de pirólise, ao passar pelos poros, teria tempo suficiente para entrar em equilíbrio térmico com a fase sólida, antes de sair pela superfície da partícula.

Para partículas com dimensões da ordem dos poros e em temperatura elevada, o tempo característico do transporte de massa por difusão é muito menor do que o tempo característico do transporte por convecção, indicando que, nestes casos, a difusão é o meio de transporte preponderante. Além disso, a cinética da reação de pirólise apresenta um tempo característico muito maior do que o tempo característico do transporte de calor por condução, indicando que a cinética de reação controla a velocidade de pirólise da partícula e ela pode ser considerada isotérmica.

Mais recentemente, CAPART, FALK E GELUS (1988) apresentaram uma análise baseada em um número adimensional de pirólise, Py , definido como :

$$Py = \frac{L^2}{\alpha k} \quad (2.1)$$

onde : α = difusividade térmica da madeira,

k = constante da reação de pirólise e

L = comprimento característico da partícula.

Segundo os autores, no caso de $Py \ll 1$, a reação de pirólise seria muito mais rápida que a difusão térmica e a pirólise ocorreria numa fina camada, que progrediria no sentido contrário ao do fluxo de calor, como no modelo de núcleo não reagido. Empregando valores da Tabela 2.1 para partículas com dimensões da ordem de 10^{-2} m, obtém-se $Py \approx 10^{-6}$, o que é mais uma indicação de que, neste caso, é a condução de calor que define a taxa de pirólise de uma partícula de biomassa de grandes dimensões.

BROWN (1972) propôs uma relação entre o fluxo de calor por transporte de massa e o fluxo de calor por condução para avaliar a necessidade de se levar estes fluxos em consideração no balanço energético. Esta relação foi definida como :

$$\frac{\text{Fluxo de energia transportado por convecção}}{\text{Fluxo de energia transportado por condução}} = \frac{c_{p,g} W_g}{K} \quad (2.2)$$

onde : W_g = fluxo mássico de produtos de pirólise na superfície da partícula,

$c_{p,g}$ = calor específico dos produtos de pirólise e

K = condutividade térmica da fase sólida.

Segundo o autor, para valores desta relação muito menores do que 1, o efeito de resfriamento provocado pela passagem de produtos de pirólise através da matriz sólida poderia ser desprezado. Ele apresentou valores para esta relação, baseados em dados experimentais de outros pesquisadores, todos maiores do que 0,1, concluindo que o efeito de resfriamento não deve ser desprezado e que deve ser levado em consideração na modelagem da pirólise de partículas.

2.2. Revisão de Modelos de Pirólise Encontrados na Literatura.

O primeiro modelo, desenvolvido para determinação do perfil de temperatura em uma placa plana de madeira submetida à pirólise, foi proposto por BAMFORD, CRANK E MALAN (1946). A equação de energia, dada pela equação (2.3), era bastante simplificada em função da carência de informações existente na época sobre as propriedades das biomassas e dos produtos de pirólise.

$$K_s \frac{\partial^2 T_s}{\partial x^2} - H_p \frac{\partial M_s}{\partial t} = c_{p,s} \rho_s \frac{\partial T_s}{\partial t} \quad (2.3)$$

onde : M_s = massa de biomassa,

t = tempo,

T_s = temperatura da fase sólida,

x = ordenada ao longo da espessura da placa,

K_s = condutividade da fase sólida,

H_p = entalpia de pirólise,

$c_{p,s}$ = calor específico da fase sólida,

ρ_s = densidade da fase sólida.

O modelo proposto procurou levar em consideração a condução de calor através da fase sólida, representada pelo primeiro termo do lado esquerdo, e a entalpia de pirólise. Não considerou o efeito de resfriamento provocado pela passagem de produtos de pirólise através da placa e as propriedades físicas da placa foram consideradas constantes.

O termo de perda de massa da biomassa, segundo do lado esquerdo da equação, foi representado por uma equação do tipo da equação de Arrhenius, de primeira ordem, apresentada a seguir :

$$-\frac{\partial M}{\partial t} = k_0 M \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (2.4)$$

onde : k_0 = constante de reação,

E = energia de ativação da reação de pirólise,

R = constante dos gases ideais e

T = temperatura.

Para uma placa de largura $2L$, aquecida em ambas as faces por uma chama, as condições de contorno adotadas na resolução do sistema de equações (2.3) e (2.4) foram :

- $T=T_b$ para $t=0$ e $0<x<2L$
- $M=cte$ para $t=0$ e $0<x<2L$
- $-K \frac{\partial T}{\partial x} = q$ para $t>0$ e $x=0, x=2L$

onde T_b era a temperatura da superfície da placa para tempos maiores do que $t=0$.

O fluxo de calor q , definido como sendo igual à soma dos fluxos de calor transportados por convecção e radiação, foi representado pela equação :

$$q = h(T_{\infty} - T_b) + \sigma(\epsilon T_{\infty}^4 - T_b^4) \quad (2. 5)$$

onde T_{∞} = temperatura da chama,

T_b = temperatura da superfície da placa,

ϵ = emissividade da chama e

σ = constante de Stefan-Boltzman.

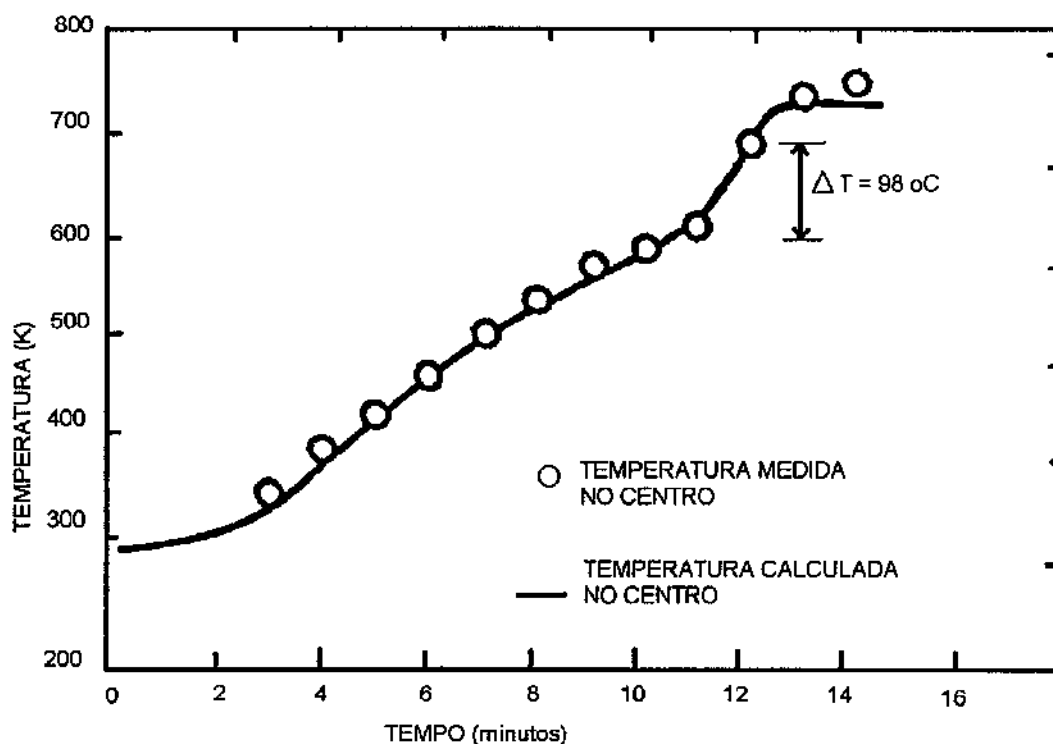


Fig. 2.1 Variação de temperatura do centro da placa com o tempo.

(Brown, 1972).

O sistema de equações (2.3) e (2.4) foi resolvido pelo método das diferenças finitas. As curvas de variação de temperatura no centro da placa, obtidas experimentalmente e por simulação, são apresentadas na Fig. 2.1.

Como se pode observar, o ajuste da curva calculada à curva experimental foi bastante satisfatório e a entalpia de reação empregada, H_p , foi calculada a partir da equação :

$$c_{pm}\rho_m\Delta T = H_p M_{m0} \quad (2.6)$$

onde : M_{m0} = massa de madeira existente no núcleo do corpo de prova,

c_{pm} = calor específico da madeira,

ρ_m = densidade da madeira e

ΔT = elevação repentina de temperatura observada no centro da placa

A partir da elevação de temperatura ΔT observada no núcleo do corpo de prova ao fim da pirólise, indicada na Fig 2.1, e da equação (2.6), calculou-se a entalpia de pirólise. O valor obtido foi positivo, levando a crer que a reação era exotérmica. A elevação repentina de temperatura observada, no entanto, pode estar associada a outros fenômenos, como a elevação da condutividade térmica da matriz de carvão e o término do efeito de resfriamento provocado pela passagem de produtos de pirólise pela matriz de carvão.

O balanço de energia proposto por KANURY (1969), conforme a equação (2.7), considerou um número maior de parâmetros e mecanismos de transporte do que a equação anterior. Além disso procurou levar em conta a variação das propriedades da partícula ao longo da pirólise.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H) = \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (W_g H_g) - H_p \left(-\frac{\partial \rho}{\partial t} \right) \quad (2.7)$$

onde : W_g = fluxo de produtos de pirólise,

ρ = densidade da madeira,

H = entalpia da fase sólida e

H_g = entalpia da fase gasosa.

KUNG (1972) resolveu numericamente a equação (2.7) pelo método de Crank e Nicholson e verificou um efeito pronunciado da condutividade do carvão sobre a taxa de pirólise em uma placa de 10^{-2} m de espessura, isolada em um dos lados, como mostrado na Fig. 2.2. Observou que quanto maior era a condutividade adotada para o carvão maior era a taxa de pirólise obtida.

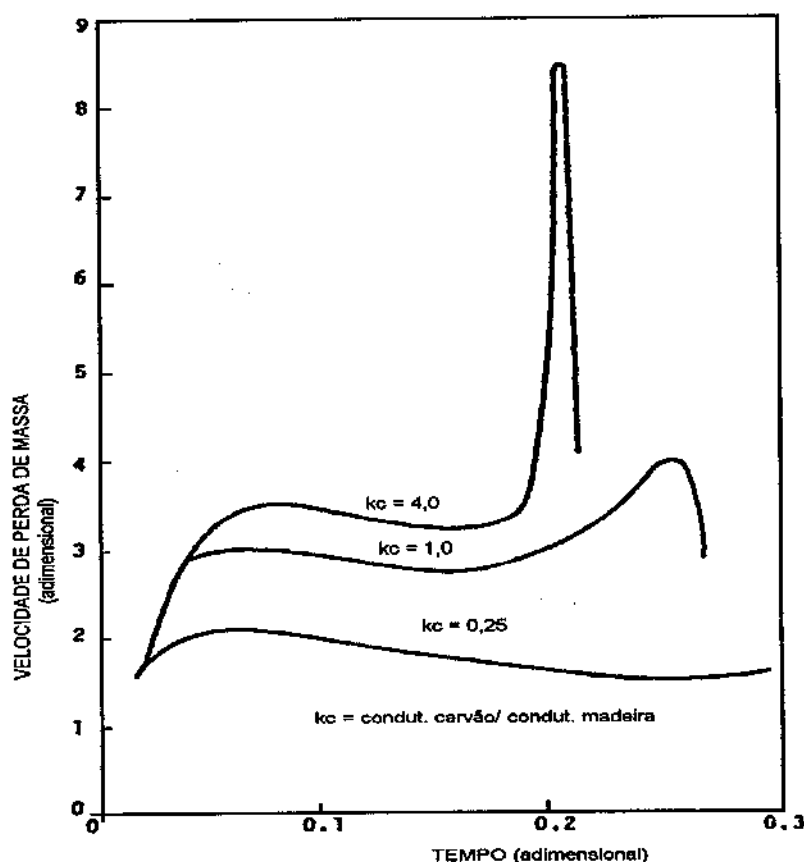


Fig. 2.2 Efeito da condutividade do carvão na velocidade de pirólise.

HAVENS (1965) propôs um modelo em que a cinética de reação foi substituída por uma capacidade energética E^* ("energy capacity"), que englobou a variação da entalpia sensível e a entalpia da reação de pirólise. Este termo foi medido experimentalmente em um calorímetro de varredura diferencial ("differential scanning calorimetry" - DSC) que mede a quantidade de energia necessária para manter duas amostras de materiais diferentes à mesma temperatura, ao longo de uma curva de aquecimento. Uma das amostras é o material a ser ensaiado e a

outra o material de referência. Se, durante o aquecimento, o material ensaiado passa por uma transformação endotérmica, como, por exemplo, fusão, o equipamento detecta uma queda de temperatura no material ensaiado, em relação à temperatura da amostra de referência, fornecendo, instantaneamente, um adicional de energia ao material ensaiado, equilibrando as temperaturas. Este adicional fornecido é proporcional à entalpia de fusão da amostra considerada. No caso de biomassa, no lugar de fusão, tinha-se pirólise. O equipamento foi purgado com nitrogênio para evitar a combustão dos produtos de pirólise e do carbono residual no interior do equipamento. Os dados registrados são apresentados na Fig. 2.3.

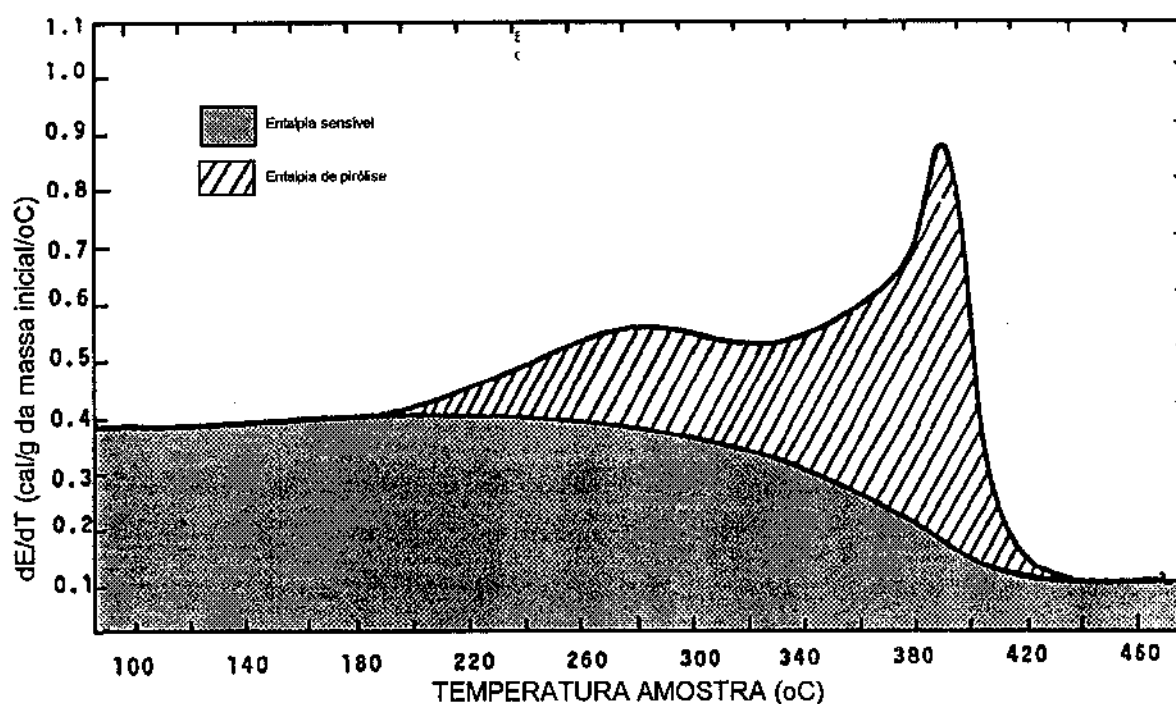


Fig. 2.3 Curvas de variação da capacidade energética com a temperatura.

As curvas apresentadas foram obtidas a partir de uma amostra de madeira de pinho seca, submetida a um aquecimento de 373 K a 733 K, a uma velocidade de 20 K/min. Segundo HAVENS, a área total sob a curva superior (listrada e cinza) representa o total de energia fornecida à amostra ensaiada. A área cinza corresponde à entalpia sensível da fração sólida remanescente no equipamento e a área listrada à entalpia de reação de pirólise do pinho (endotérmica).

A equação de energia no modelo proposto por HAVENS é dada por :

$$E \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (2.8)$$

que é uma forma simplificada da equação de energia (2.7), que também pode ser escrita na forma :

$$\rho \frac{\partial H}{\partial t} + H \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial T}{\partial x} \right) - H_g \frac{\partial W_g}{\partial x} - W_g \frac{\partial H_g}{\partial x} - H_p \left(-\frac{\partial \rho}{\partial t} \right) \quad (2.9)$$

Como, durante a pirólise, a perda de peso da fase sólida é igual à da geração de produtos de pirólise, a equação de continuidade, aplicada a uma partícula perdendo massa somente em uma direção, permite escrever que:

$$\frac{\partial W_g}{\partial x} = -\frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (2.10)$$

Substituindo a equação (2.10) em (2.9) e rearranjando os termos, chega-se a :

$$\rho \frac{\partial H}{\partial t} + (H - H_p - H_g) \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial T}{\partial x} \right) - W_g \frac{\partial H_g}{\partial x} \quad (2.11)$$

Definindo o termo de energia, E_p , como :

$$E_p = H - H_p \quad (2.12)$$

onde H_p não depende do tempo e da temperatura, e substituindo em (2.11), obtém-se :

$$\rho \frac{\partial E_p}{\partial t} + (E_p - H_g) \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial T}{\partial x} \right) - W_g \frac{\partial H_g}{\partial x} \quad (2.13)$$

Desprezando o último termo do lado direito da equação, referente ao resfriamento da fase sólida provocado pelo escape de produtos de pirólise, a equação (2.13) assume a forma :

$$\left[\rho \frac{\partial E_p}{\partial T} + (E_p - H_g) \frac{\partial \rho}{\partial T} \right] \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (2.14)$$

O termo entre colchetes é a capacidade energética, E^* , definida por HAVENS, e engloba as entalpias da fase sólida, dos produtos de pirólise e da reação de pirólise.

Assumindo valores para a condutividade térmica e empregando valores de E^* , obtidos experimentalmente a partir da área sob a curva superior da Fig. 2.3, HAVENS resolveu o modelo pelo método de volumes finitos e comparou os resultados de simulação com os dados experimentais obtidos em um cilindro de pinho. O cilindro era aquecido internamente por resistência elétrica, dissipando uma potência elétrica conhecida, e dispunha de termopares dispostos ao longo do raio. Os produtos da pirólise eram retirados pelo centro do cilindro com o fluxo de calor, neste caso, caminhando do centro para a superfície externa do corpo de prova.

Para melhorar o ajuste do modelo aos dados experimentais, HAVENS teve de elevar a condutividade da madeira adotada em 20 % e a do carvão em 75 %. A condutividade do carvão utilizada anteriormente se baseava na densidade do carvão e era menor que a da madeira.

Os resultados obtidos por HAVENS (1965) e KUNG (1972) estimularam BROWN (1972) a determinar experimentalmente a condutividade de carvão vegetal

em temperaturas elevadas, sem passar por um processo de resfriamento, que provoca o aparecimento de fissuras ao longo da matriz de carvão, reduzindo a sua condutividade. A condutividade do carvão obtida se mostrou maior que a normalmente encontrado na literatura, calculada como sendo proporcional à densidade do carvão.

BROWN incorporou ao modelo de HAVENS esta nova condutividade e levou em consideração o resfriamento provocado pela passagem dos produtos de pirólise pelas camadas carbonizadas e a velocidade de aquecimento. A Fig. 2.4 mostra os resultados obtidos. Observe-se que a incorporação de cada efeito, individualmente, melhora o ajuste das curvas aos dados experimentais, principalmente para as posições mais próximas ao centro do corpo de prova, submetidas mais intensamente à passagem dos produtos de pirólise. Neste experimento os gases de pirólise caminhavam da superfície externa para o centro do cilindro.

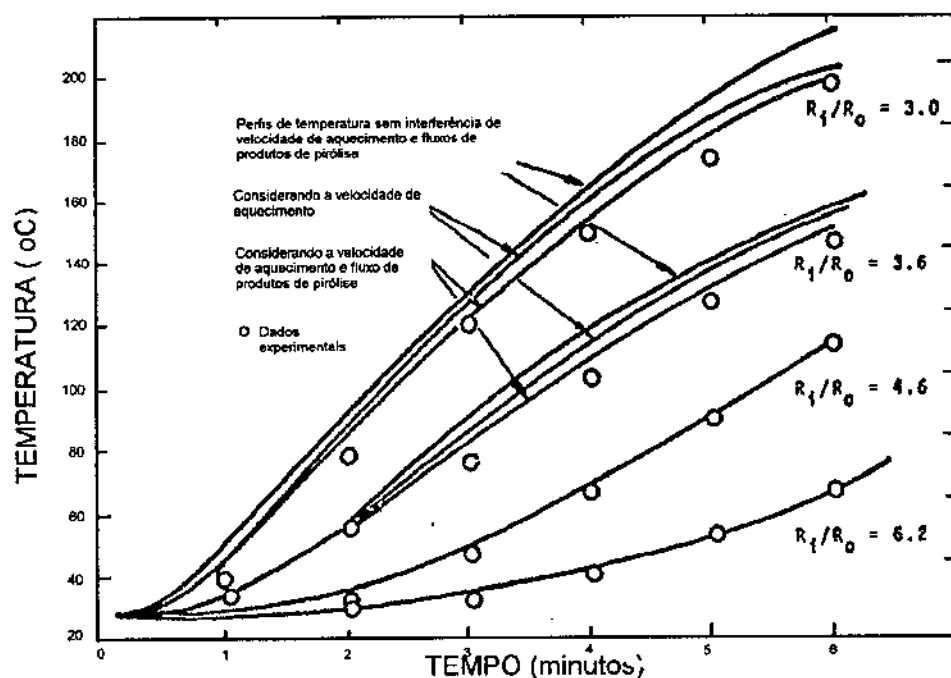


Fig. 2.4 Influência do resfriamento e da velocidade de aquecimento nos perfis de temperatura obtidos por Brown.

Observe-se ainda que, apesar dos fenômenos incorporados afetarem os perfis de temperatura, os efeitos são de segunda ordem.

A dificuldade na aplicação do modelo desenvolvido por HAVENS (1965) e complementado por BROWN (1972), é que ela depende do levantamento experimental da capacidade energética E^* para cada tipo de biomassa ensaiada. Este termo, como verificado por ambos, varia muito de espécie para espécie. Para a simulação de equipamentos de gaseificação e pirólise é mais interessante utilizar modelos mais genéricos, mesmo que eles impliquem em simulações menos precisas, para ampliar o seu campo de aplicação.

Modelos mais recentes de pirólise seguem o proposto por KANURY (1969), empregando novas cinéticas e incorporando outros efeitos como reações de decomposição de alcatrões dentro das partículas, secagem simultânea à pirólise etc.

No modelo proposto por CHAN, KELBON E KRIEGER (1985) a reação de pirólise foi tratada como um conjunto de três reações em paralelo : sólido→gás ; sólido→alcatrão ; sólido→carvão. Ele incorporou, além disso, uma reação de decomposição de alcatrão dentro da partícula e a secagem foi tratada como uma reação química, com a cinética correspondente.

A abordagem da secagem junto com a pirólise é importante porque estes processos normalmente ocorrem simultaneamente na maioria dos equipamentos que operam com biomassa. A secagem, assim como a pirólise, é muito afetada pela taxa de transferência de calor e pela condutividade térmica da madeira, tornando questionável a sua representação por uma cinética, função somente da temperatura da partícula e de coeficientes de difusividade, como tratada em diversos modelos.

ALVES E FIGUEIREDO (1989) propuseram a modelagem da secagem através da existência de uma frente de secagem, que caminha no mesmo sentido

do fluxo de calor, atrás da qual somente existe madeira seca e a frente somente madeira úmida, com umidade constante. A quantidade de água evaporada na frente de secagem foi calculada a partir do fluxo de calor nesta frente. Os autores verificaram que, nas condições ensaiadas, a difusão de água ligada era desprezível em relação ao fluxo de vapor gerado na frente de secagem, o mesmo não ocorrendo com a água livre, levando-os a concluir que o modelo proposto somente é válido para madeiras com umidade abaixo de 45%. A difusão de vapor foi desprezada, seguindo modelo de secagem rápida, o que restringe sua aplicação a casos onde a temperatura dos gases, em contato com as partículas, esteja acima de 423 K, condição normalmente encontrada em gaseificadores e fornos de pirólise.

A pirólise, no modelo proposto por ALVES E FIGUEIREDO (1989), foi tratada através de um conjunto de seis reações em paralelo, resultado da divisão da madeira em seis componentes, cada um com um determinado grau de estabilidade térmica e cinética de decomposição. Esta metodologia está de acordo com o observado por outros pesquisadores como HAJALIGOL (1982), NUNN (1985) E AKITA (1972) segundo os quais a biomassa pode ser dividida em seus constituintes principais : hemi-celulose, celulose e lignina e a pirólise ser representada pela decomposição térmica de cada um dos seus constituintes, isoladamente.

2.3. Modelagem de Gaseificadores.

2.3.1. Revisão de Modelos de Gaseificadores.

Os principais tipos de gaseificadores existentes são os de leito móvel, que podem operar com fluxos de gases e sólidos em sentidos contracorrente e

concorrente, de leito fluidizado e ciclônicos. Os gaseificadores de leito móvel são mais adequados para operar com partículas na faixa de 0,02 m de diâmetro, os gaseificadores ciclônicos para operar com partículas finas, menores que 0,001 m, e os de leito fluidizado em ambas as faixas.

No presente trabalho estudou-se os gaseificadores de leito movente contracorrente. A modelagem destes gaseificadores deve levar em conta a existência de regiões de aquecimento, secagem, pirólise, gaseificação e combustão.

A grande maioria dos modelos de gaseificadores de leito móvel contracorrente existentes, como os desenvolvidos por YOON ET ALL (1978), DESAI e WEN (1978), STILLMAN (1979), CHOO e JOSEPH (1981), foram desenvolvidos para carvões minerais que, em geral, apresentam teores de umidade e matéria volátil muito menores que biomassas.

Em função disto os modelos citados tratam de forma simplificada as etapas de aquecimento, secagem e pirólise o que normalmente provoca grandes desvios na simulação de gaseificação de biomassas.

SOUZA SANTOS (1985) desenvolveu um programa de simulação unidimensional de um gaseificador para carvões e biomassas onde procurou tratar de forma mais detalhada as etapas de combustão, gaseificação, pirólise e secagem.

A pirólise foi considerada sob controle da cinética de duas reações em paralelo e da difusão dos respectivos produtos de pirólise, um no estado gasoso - gás de pirólise - e outro no estado líquido - alcatrão. As reações de decomposição do alcatrão foram levadas em consideração somente na fase gasosa, fora da partícula sólida.

O modelo adotado na pirólise foi o de núcleo não reagido, no qual uma frente de pirólise caminha em sentido contrário ao dos produtos da pirólise. Atrás da frente encontra-se uma camada de carvão, através da qual os produtos líquidos e gasosos de pirólise têm de se difundir, e antes da frente, madeira não reagida. Trata-se de uma adaptação do modelo de núcleo não reagido, empregado nas regiões de combustão e gaseificação, às condições de pirólise.

A secagem foi tratada de maneira análoga a uma reação química. A taxa de secagem foi considerada proporcional à diferença entre a pressão de saturação de vapor d'água na temperatura da partícula sólida e a pressão parcial de vapor d'água na fase gasosa do lado externo à partícula.

A biomassa, neste modelo, foi dividida em quatro componentes : carvão, matéria volátil, umidade e cinza, cujos teores são obtidos através da análise imediata do combustível. A matéria volátil é a única que participa da reação de pirólise, segundo o esquema apresentado na Fig. 2.5.

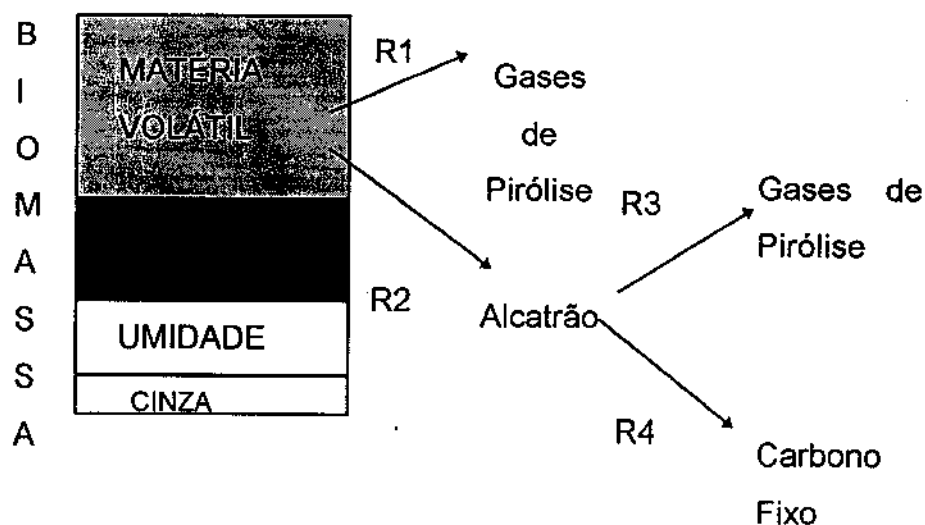


Fig. 2.5 Esquema de pirólise de biomassa adotado por SOUZA SANTOS.

A matéria volátil se decompõe em gases e alcatrão, através de duas reações paralelas, representadas por R1 e R2. O alcatrão, por sua vez, se decompõe em gases e carbono fixo, através das reações R3 e R4, na fase gasosa do gaseificador.

A composição elementar da matéria volátil foi determinada a partir da composição elementar do gás de pirólise, obtida experimentalmente. Assume-se que a sua composição elementar em carbono, hidrogênio, oxigênio, enxofre e nitrogênio é igual à do gás de pirólise. Admite-se, ainda, que a composição elementar do alcatrão também é igual ao da matéria volátil. Como a análise elementar da biomassa é conhecida pode-se obter a análise elementar do carbono fixo por diferença. Dependendo da composição do gás de pirólise com que se trabalha, por exemplo, gás com teor de hidrogênio muito elevado, pode-se obter teor negativo deste componente no carbono fixo. O modelo, neste caso, assume um valor zero para o teor de hidrogênio no carbono fixo.

A fração de alcatrão é considerada constituída por um único componente, de peso molecular igual ao da glicose, componente normalmente encontrado em quantidades significativas em alcatrões provenientes da pirólise de biomassa. Estes alcatrões têm composição muito complexa, apresentando um número grande de componentes, sendo os principais açúcares da família da glicose, óleo creosoto, ácido acético, água, metanol etc.

O fluxo molar de produtos de pirólise J_i que sai através da superfície das partículas é dado por :

$$J_i|_{y=y_s} = v_{i,j} \frac{(C_{vi} - C_{vz})}{y_s \sum_{m=1}^3 \zeta_{m,j}} \quad (2.15)$$

onde : ζ_m = fator de atenuação da reação j ,

y_s = espessura da partícula,

C_{vi} = concentração inicial de matéria volátil na biomassa,

C_{vz} = concentração de matéria volátil na cota z .

j = reação de pirólise e

i = produto de pirólise.

Os fatores de atenuação que aparecem na equação (2.15) correspondem a resistências em série devidas, respectivamente, à existência de uma camada limite em torno da partícula, à difusão de produtos de pirólise através de camada de carvão e à cinética de decomposição de matéria volátil. Estas resistências podem ser deduzidas a partir do balanço de massa de um componente gasoso na fase sólida, como é mostrado mais adiante, e apresentam a forma:

$$\zeta_{1,j} = \frac{1}{N_{Sh} D_{fg,i}} \quad (2.16)$$

$$\zeta_{2,j} = \frac{1-a}{D_{fn,i} a} \quad (2.17)$$

$$\zeta_{3,j} = \frac{1}{a D_{fc,i} [N_{Th} a \coth(a N_{Th}) - 1]} \quad (2.18)$$

onde : $D_{fg,i}$ = difusividade do componente gasoso i na camada limite em torno das partículas,

$D_{fc,i}$ = difusividade do componente gasoso i na camada de carvão,

$D_{fn,i}$ = difusividade do componente gasoso i no núcleo não reagido,

$$N_{Th} = y_s \left(\frac{k_j}{D_{fc,i}} \right)^{0,5} \quad (2. 19)$$

a = fração de material não reagido na partícula,

k_j = constante de reação de pirólise,

$$N_{Sh} = \frac{k_{TM,i} y_s}{D_{fg,i}} \quad e \quad (2. 20)$$

$k_{TM,i}$ = coeficiente de película de transporte de massa do componente i .

2.3.2. Considerações sobre o Modelo de Souza Santos.

O modelo proposto por SOUZA SANTOS (1985) foi verificado por comparação com resultados experimentais obtidos em ensaios de gaseificação realizados no IPT (1985) empregando cavacos de madeira com espessura da ordem de 0,015 m. A análise apresentada no item 2.1 mostra que, nestas condições, os parâmetros mais relevantes à pirólise de partículas de biomassa são a transferência de calor entre a fase gasosa e a sólida, a condução de calor para dentro da partícula e o efeito de resfriamento provocado pelo escoamento convectivo dos produtos de pirólise através da fase sólida. No modelo em discussão os dois últimos parâmetros não são considerados. Por outro lado, ele

leva em consideração a resistência à difusão de produtos de pirólise no interior das partículas que, como visto anteriormente, pode ser desprezada frente à convecção.

Para a modelagem da secagem foi utilizada uma expressão semelhante à da equação (2.15) sem o termo de atenuação devido à reação química. Os fatores controladores da secagem foram a difusão do vapor através da biomassa seca e a temperatura da partícula. O gradiente de concentração do vapor d'água foi considerado igual ao gradiente de pressão de vapor d'água existente entre o interior da partícula - igual à pressão de saturação de vapor à temperatura do sólido - e a pressão parcial de vapor d'água na fase gasosa. Para as temperaturas da fase sólida obtidas na simulação da região de secagem, da ordem de 673 K, esta modelagem gerava gradientes de pressão muito elevados, acelerando em demasia a secagem.

O modelo forneceu composições da fase gasosa próximas às obtidas no ensaio experimental, mas apresentou desvios significativos nos perfis de temperatura. As considerações feitas levantam dúvidas quanto aos resultados da aplicação do modelo desenvolvido por SOUZA SANTOS (1985) na simulação de gaseificadores operando com partículas de biomassa com dimensões e umidades diferentes das empregadas no ensaio experimental.

Capítulo 3

3. MODELAGEM DO GASEIFICADOR DE LEITO MÓVEL CONTRACORRENTE.

3.1. *Introdução.*

A modelagem do gaseificador de leito móvel contracorrente, objeto desta pesquisa, foi desenvolvida levando em conta a possibilidade de comparação dos resultados obtidos com os dados experimentais da operação de um gaseificador experimental construído pelo IPT em São Paulo.

Trata-se de um gaseificador cilíndrico com 3 m de altura e 0,5 m de diâmetro, operando em regime permanente e escoamento contracorrente. O desenho esquemático do gaseificador é apresentado na Fig.3.1. Cavacos de Eucalyptus são alimentados em batelada pelo topo enquanto ar e vapor d'água são alimentados continuamente pela base do leito, através de uma grelha rotativa. Esta grelha é excêntrica, permitindo o revolvimento da carga, o que dificulta o engaiolamento de cavacos no interior do gaseificador. Durante todo o ensaio

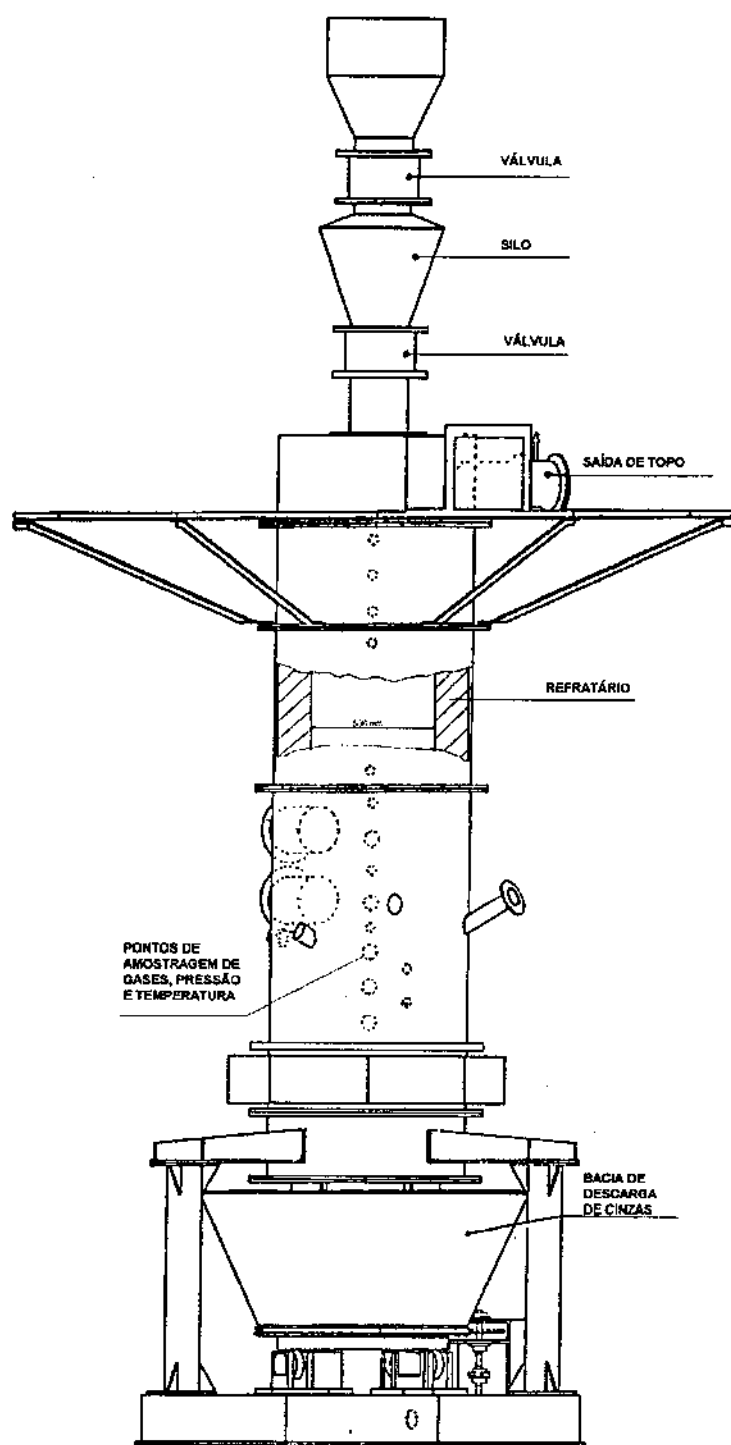


Fig. 3.1 Desenho do gaseificador ensaiado.

experimental a altura do leito se manteve em torno de 2,09 m. Os parâmetros operacionais do ensaio experimental são apresentados no Capítulo 6.

O interior de um gaseificador de leito movente contracorrente, operando com partículas de biomassa, pode ser dividido, de forma simplificada, em duas fases, sólida e gasosa, como esquematizado na Fig.3.2. A fase sólida, embora seja constituída por partículas, é tratada como uma fase contínua nesta modelagem.

O gaseificador apresenta 5 regiões distintas, quais sejam : região de aquecimento, secagem, pirólise, gaseificação e combustão de partículas. Estas regiões podem se sobrepor uma às outras, ao longo do gaseificador, como será visto mais adiante.

Ar e vapor d'água são introduzidos no gaseificador pela base do leito, reagindo com carvão presente nesta região. O oxigênio do ar é rapidamente consumido e a temperatura da fase gasosa se eleva abruptamente, acumulando parte da energia liberada na reação de combustão do carbono e dos gases combustíveis na forma de entalpia sensível. Esta energia é dissipada posteriormente nas regiões superiores, para promover a gaseificação, pirólise, secagem e aquecimento da fase sólida, e para o meio ambiente através da parede do reator. Produtos de combustão, gaseificação, pirólise e secagem vão sendo incorporados à fase gasosa, na qual podem reagir entre si ou sofrer decomposição, até saírem pelo topo do gaseificador.

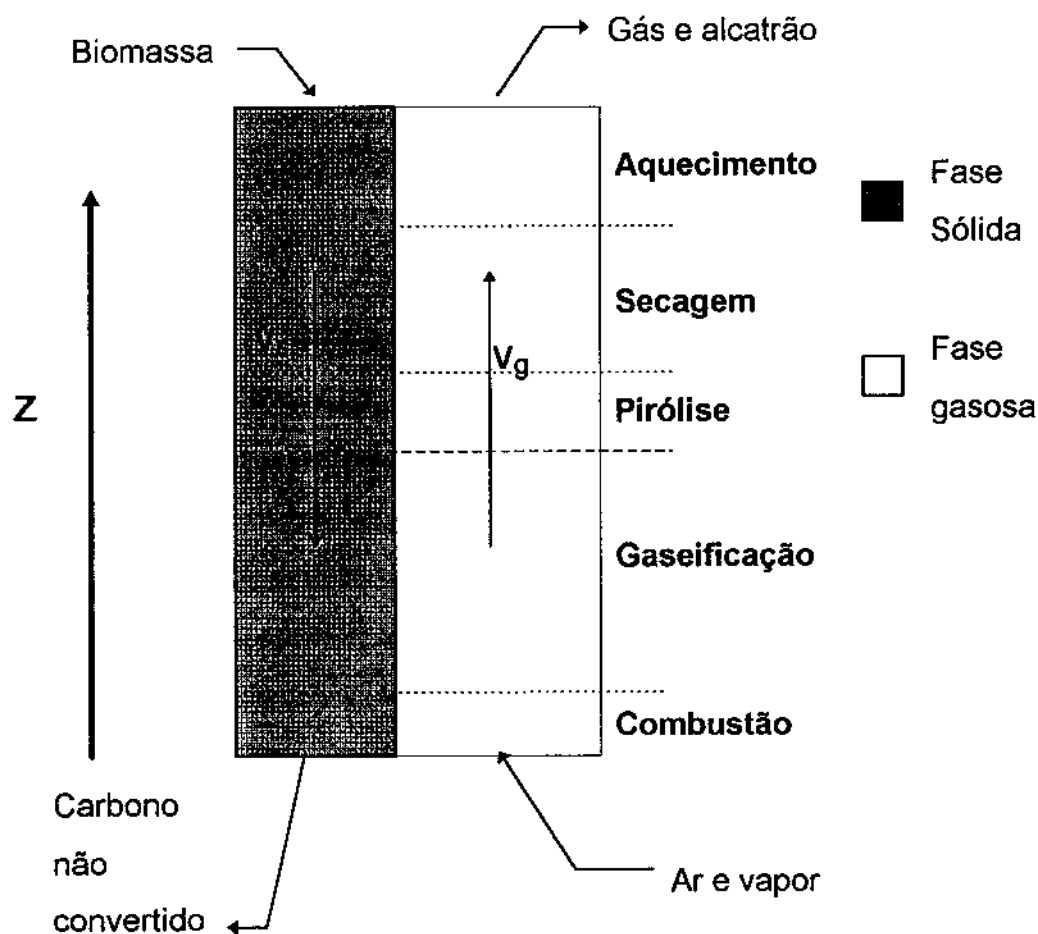


Fig. 3.2 Representação das regiões e fases existentes em um gaseificador de leito movente contracorrente.

A área ocupada pela fase gasosa numa seção transversal do gaseificador é igual à área transversal do gaseificador multiplicada pela porosidade do leito (ϵ_L). A área da interface sólido-gás, através da qual se dá a troca de calor e massa, é igual à soma das áreas das partículas que compõem a fase sólida.

O material sólido, alimentado pela parte superior do gaseificador, desce em contracorrente ao fluxo gasoso com velocidade constante V_s . Na região de aquecimento os cavacos não sofrem perda de massa, somente aquecimento.

Quando a temperatura da superfície da partícula sólida atinge a temperatura de saturação da umidade da biomassa, inicia-se a secagem. Uma frente de secagem caminha em direção ao centro da partícula, antes da qual existe biomassa com umidade constante e atrás, biomassa seca, segundo modelo proposto por ALVES e FIGUEIREDO (1989).

Durante a descida de uma partícula ao longo do leito a região seca vai se ampliando e a temperatura desta região vai se elevando. Quando a temperatura da superfície externa do material sólido se aproxima de 473 K, tem início a pirólise da biomassa seca. A secagem e a pirólise podem ocorrer simultaneamente, dependendo das taxas de troca de calor e das dimensões das partículas.

O modelo proposto considera a biomassa na forma de uma partícula contínua em forma de placa, descendo ao longo do gaseificador, com um eixo de simetria situado em $y=0$. A Fig.3.3 representa um trecho desta partícula contínua, indicando a frente de secagem e a região de pirólise.

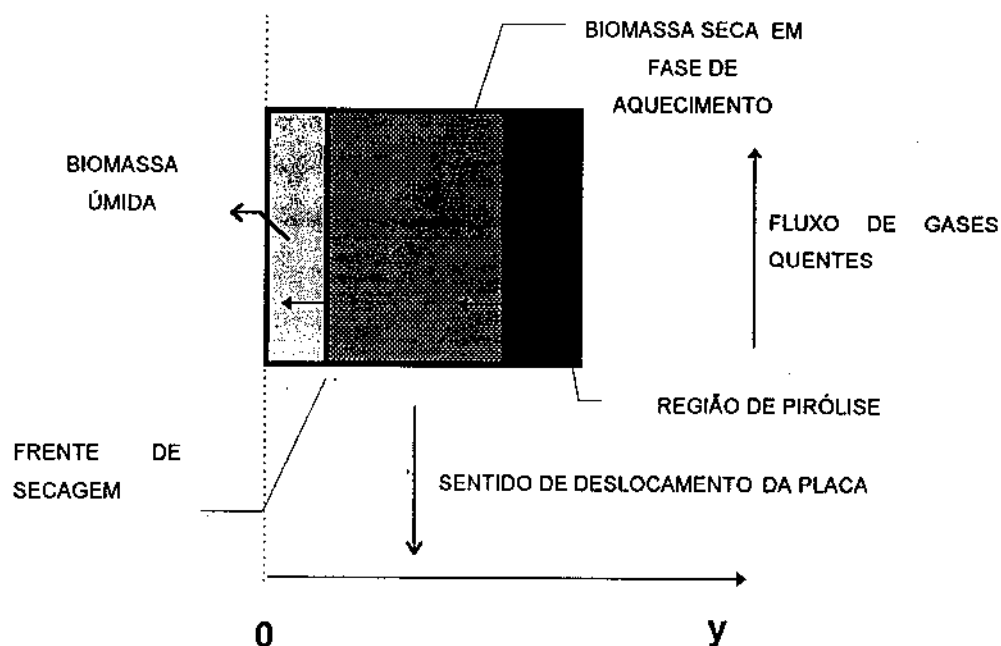


Fig. 3.3 Representação da frente de secagem e da região de pirólise no interior de um cavaco contínuo.

Observe-se que neste modelo não existe uma frente de pirólise semelhante à frente de secagem. A pirólise pode ocorrer em toda a região de pirólise enquanto a secagem ocorre somente na interface entre as regiões de madeira úmida e seca. Além disso o teor de matéria volátil pode variar ao longo da região de pirólise, o mesmo não ocorrendo com o teor de umidade.

Após o fim da pirólise, que acontece quando a região de pirólise atinge o centro da partícula e o teor de matéria volátil nesta região cai a zero, inicia-se a gaseificação e, posteriormente, a combustão da massa de carbono fixo remanescente na placa.

Na região de combustão e gaseificação o modelo adotado é o de núcleo exposto, ou seja, a espessura da placa vai se reduzindo conforme ela vai sendo consumida, sem a formação de uma camada de cinza presente no lado externo. Esta hipótese é baseada no fato de que o teor de cinza em biomassas é geralmente reduzido e a cinza gerada é muito friável, sendo facilmente removida da superfície da partícula. Um esquema deste modelo é apresentado na Fig. 3.4.

O modelo de núcleo exposto adotado pressupõe ainda que a densidade do carvão permanece constante no núcleo não reagido, o que é uma aproximação para a região onde a gaseificação é intensa. As reações de gaseificação são lentas, comparadas às reações de combustão e, normalmente, ocorrem ao longo de toda a partícula - são volumétricas - o que provoca uma variação de densidade do carbono ao longo da espessura. A reação de combustão, por ser muito mais rápida do que a de gaseificação, ocorre principalmente na superfície da partícula, praticamente sem alterar a densidade de carbono no núcleo, se aproximando do modelo de núcleo exposto adotado.

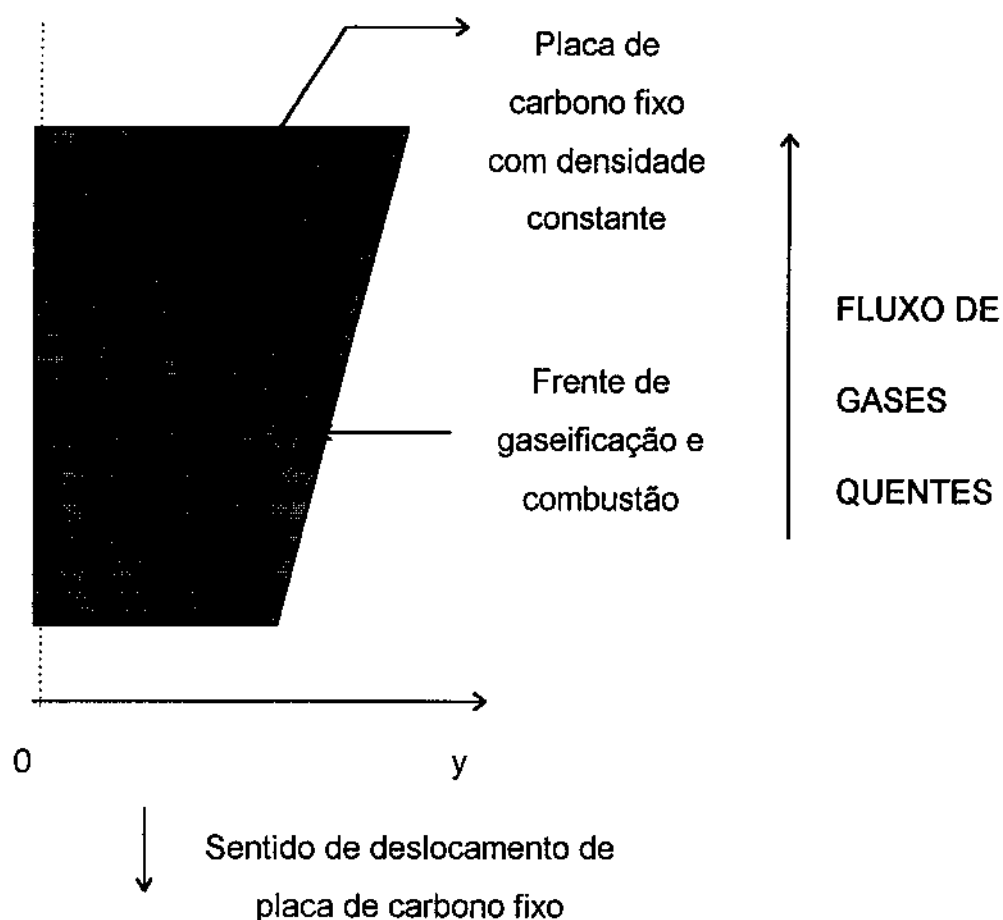


Fig. 3.4 Representação esquemática de uma placa de carbono fixo descendo nas regiões de gaseificação e combustão.

Observe-se, na Fig. 3.4, que a espessura da placa de carbono fixo vai diminuindo do topo para a base do gaseificador e a densidade permanece constante. O desenvolvimento de um modelo que leve em conta a variação de densidade de carbono ao longo da partícula, principalmente na região de gaseificação, é sugerido para trabalhos futuros.

3.2. Equações Fundamentais.

A aplicação das equações fundamentais de conservação de massa e de energia nas duas fases consideradas no interior do gaseificador é apresentada a seguir.

3.2.1. Equação da Continuidade.

A equação da continuidade para as espécies químicas em coordenadas retangulares foi desenvolvida a partir do balanço de massa em um elemento de volume ΔV , das fases sólida ou gasosa, segundo BIRD, STEWART E LIGHTFOOT (1960).

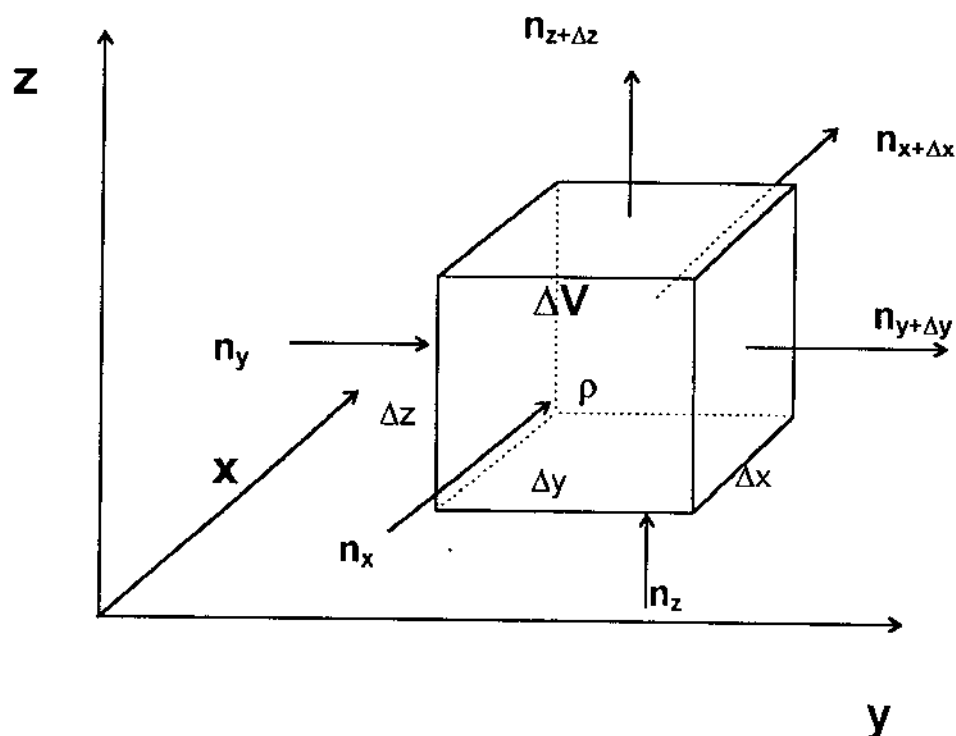


Fig. 3.5 Representação de fluxos de massa entrando e saindo de um elemento de volume ΔV do reator.

A variação de massa de um componente i , no elemento de volume ΔV da Fig.3.5, é igual a soma das correntes de entrada deste componente, menos as de saída e mais a taxa de formação ou consumo deste componente, como representado na equação (3.1).

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_i}{dt} \Delta x \Delta y \Delta z = & n_{ix}|_x \Delta y \Delta z - n_{ix}|_{x+\Delta x} \Delta y \Delta z + n_{iy}|_y \Delta x \Delta z - n_{iy}|_{y+\Delta y} \Delta x \Delta z + \\ & n_{iz}|_z \Delta x \Delta y - n_{iz}|_{z+\Delta z} \Delta x \Delta y + \sum_j v_{ij} R_j M_i \Delta x \Delta y \Delta z \end{aligned} \quad (3.1)$$

onde : n_{ix} = fluxo mássico do componente i normal à superfície de área $\Delta y \Delta z$,

n_{iy} = fluxo mássico do componente i normal à superfície de área $\Delta x \Delta z$,

n_{iz} = fluxo mássico do componente i normal à superfície de área $\Delta x \Delta y$,

R_j = velocidade molar de reação j ,

v_{ij} = coeficiente estequiométrico molar do componente i na reação j e

M_i = massa molecular do componente i .

O fluxo mássico vetorial do componente i , n_i , é igual à soma dos vetores de transporte convectivo $w_i \rho \mathbf{v}$ e difusivo $\mathbf{j}_i$ deste componente, como definido na equação (3.2).

$$\mathbf{n}_i = w_i \rho \mathbf{v} + \mathbf{j}_i \quad (3.2)$$

onde w_i é a fração mássica do componente i .

O termo difusivo, por sua vez, é dado por :

$$\mathbf{j}_i = -\rho D_{fi} \nabla \cdot \mathbf{w}_i \quad (3.3)$$

onde D_{fi} é a difusividade do componente i no meio considerado.

Dividindo a equação (3.1) pelo produto $\Delta x \Delta y \Delta z$ e levando ao limite, com $\Delta x \Delta y \Delta z \rightarrow 0$, a equação de continuidade assume a forma :

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -\frac{\partial n_{ix}}{\partial x} - \frac{\partial n_{iy}}{\partial y} - \frac{\partial n_{iz}}{\partial z} + \sum_j v_{ij} R_j M_i \quad (3.4)$$

Substituindo o fluxo mássico, definido em (3.2), na equação (3.4), resulta :

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -\frac{\partial(\rho_i v_x)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho_i v_y)}{\partial y} - \frac{\partial(\rho_i v_z)}{\partial z} - \frac{\partial j_{ix}}{\partial x} - \frac{\partial j_{iy}}{\partial y} - \frac{\partial j_{iz}}{\partial z} + \sum_j v_{ij} R_j M_i \quad (3.5)$$

Para uma mistura esta equação pode ser escrita :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} - \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} - \frac{\partial j_x}{\partial x} - \frac{\partial j_y}{\partial y} - \frac{\partial j_z}{\partial z} + \sum_i \sum_j v_{ij} R_j M_i \quad (3.6)$$

onde o último termo representa a taxa de incorporação ou perda de massa no volume ΔV devido às reações químicas j .

3.2.2. Equação da Conservação de Energia.

Há diversas formas de apresentação da equação geral de energia, todas deduzidas a partir do balanço de energia num elemento de volume ΔV . A equação de energia empregada neste trabalho é a expressa em termos de calor específico, c_p , mostrada a seguir, conforme BIRD, STEWART e LIGHTFOOT (1960).

$$\begin{aligned}
 \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = & -\rho c_p \left(v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_y \frac{\partial T}{\partial y} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) \\
 & - \left(\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} \right) \\
 & - \tau_{xx} \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} \right) - \tau_{yy} \left(\frac{\partial v_y}{\partial y} \right) - \tau_{zz} \left(\frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \\
 & - \tau_{xy} \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) - \tau_{yz} \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \right) - \tau_{zx} \left(\frac{\partial v_z}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) \\
 & + \sum_i (j_{ix} g_x + j_{iy} g_y + j_{iz} g_z) \\
 & + \left(\frac{\partial \ln \bar{V}}{\partial \ln T} \right)_{p, x_i} \left(\frac{\partial p}{\partial t} + v_x \frac{\partial p}{\partial x} + v_y \frac{\partial p}{\partial y} + v_z \frac{\partial p}{\partial z} \right) \\
 & + \sum_i (\bar{H}_i + \bar{H}_i^0) \left[\left(\frac{\partial j_{ix}}{\partial x} + \frac{\partial j_{iy}}{\partial y} + \frac{\partial j_{iz}}{\partial z} \right) - \sum_j v_{ij} R_j \right] \quad (3.7)
 \end{aligned}$$

onde : $\mathbf{q}$ = fluxo de calor vetorial,

τ = tensor das tensões,

$\bar{V}$ = volume molar específico,

$\mathbf{g}$ = vetor aceleração da gravidade,

$\bar{H}_i = \bar{c}_{pi}(T - T_0)$, entalpia específica molar do componente i

$\bar{H}_i^0$ = entalpia molar de formação do componente i e

$\mathbf{J}_i$ = fluxo molar vetorial do componente i.

Os termos do lado direito da equação se referem, respectivamente, ao calor transportado por convecção e difusão, ao trabalho das forças cisalhantes, ao trabalho contra as forças de campo, ao trabalho das forças normais e à variação de energia envolvida na reação química.

O vetor de transporte difusivo de calor, $\mathbf{q}$, é admitido englobando os fluxos de calor transportados por condução, difusão de massa e radiação térmica. O componente na direção x é dado por :

$$q_x = -K \frac{\partial T}{\partial x} + \sum_i (\bar{H}_i + \bar{H}_i^0) J_{ix} + q_{rx} \quad (3.8)$$

onde q_{rx} é o fluxo de calor transportado por radiação, na direção x.

3.3. Modelagem da Fase Sólida.

Nesta modelagem a fase sólida é dividida em duas partes distintas. A primeira tem início no ponto de injeção de ar e vapor na base do gaseificador, e engloba as regiões de combustão e gaseificação do carbono fixo da biomassa. A segunda tem início no fim da região de gaseificação e é constituída pelas regiões de pirólise, secagem e aquecimento de biomassa.

As equações de conservação, as hipóteses simplificadoras e as condições de contorno assumidas para cada parte são distintas e tratadas separadamente.

No modelo são considerados 13 componentes gasosos, numerados de 1 a 13, e 5 componentes sólidos, numerados de 14 a 19.

3.3.1. Modelagem da Fase Sólida nas Regiões de Combustão e Gaseificação.

O modelo adotado para as regiões de combustão e gaseificação da fase sólida foi desenvolvido a partir de SOUZA SANTOS (1985). Incorporou-se a este modelo o transporte de calor por condução e radiação, através da fase sólida, na direção axial. Este procedimento introduz derivadas de segunda ordem no sistema de equações diferenciais, suavizando o perfil de temperatura da fase sólida nesta região.

a) Hipóteses Simplificadoras.

As hipóteses simplificadoras assumidas na modelagem, com as justificativas correspondentes, são apresentadas a seguir :

- Regime permanente.

Apesar da alimentação e da retirada de sólidos pelo fundo do gaseificador experimental de referência terem sido intermitentes, em batelada, elas foram feitas em intervalos regulares de tempo. Em adição, os volumes das cargas e descargas foram pequenos em relação ao volume de material existente no interior do gaseificador, levando a uma operação em regime aproximadamente permanente. As vazões de ar e vapor foram mantidas constantes ao longo do ensaio.

- A difusão de componentes gasosos na fase sólida é considerada somente na direção lateral y.

A fase sólida é considerada constituída por componentes sólidos e gasosos, estes últimos ocupando os poros da fase sólida. As reações de combustão e gaseificação envolvem o transporte de componentes gasosos do meio externo para o interior da partícula, e vice-versa; através dos poros. Como o gradiente de pressão entre o centro da partícula e a fase gasosa externa é muito pequeno nas regiões de combustão e gaseificação, este transporte se dá prioritariamente por difusão, podendo-se desprezar o transporte por convecção de componentes gasosos no interior da fase sólida.

Além disso, para partículas em forma de cavaco, que é o caso deste trabalho, a largura e a altura são muito maiores do que a espessura, sendo razoável supor que a difusão de componentes gasosos ocorre somente na direção de menor comprimento (espessura ou eixo y no presente caso). Desta forma a difusão de componentes gasosos na fase sólida, ao longo do comprimento e da largura da partícula, pode ser desprezada.

- O transporte convectivo dos componentes sólidos é considerado somente na direção axial z .

O tempo de residência dos componentes gasosos dentro da fase sólida é pequeno, em função da pequena espessura dos cavacos podendo-se, em consequência, desprezar o transporte convectivo dos componentes gasosos existentes nos poros da fase sólida na direção axial do gaseificador.

Os componentes sólidos não se difundem, sendo transportados somente por convecção na direção axial do gaseificador. A velocidade de descida dos componentes sólidos é igual à velocidade das partículas de biomassa.

- As seções das placas de carbono fixo, transversais ao eixo z , são admitidas isotérmicas.

A hipótese de seção transversal isotérmica é assumida na região de combustão, devido à pequena espessura das placas de carbono fixo ao chegarem na base de gaseificadores contracorrente.

Esta hipótese também é assumida na região de gaseificação. As partículas, nesta região, apresentam espessuras maiores do que na região de combustão e as reações são endotérmicas e volumétricas. Em função disto, a rigor, as partículas devem apresentar um gradiente de temperatura significativo entre o centro e a superfície externa, como mostrado por CHEN e GUNKEL (1987), que simularam a

gaseificação de uma partícula isolada de carvão mineral. O tratamento não isotérmico das partículas na região de gaseificação, no entanto, é deixado como tema para desenvolvimento futuro do modelo.

- O gaseificador e as partículas sólidas são admitidos isobáricos.

A pressão é considerada constante no interior do leito. Esta simplificação foi sugerida pelo fato de que a perda de pressão, medida ao longo de 2,09 m de altura de leito no ensaio experimental do gaseificador de referência, foi muito pequena, da ordem de 300 a 1600 Pa.

As partículas de biomassa e de carvão, por sua vez, normalmente apresentam porosidade elevada, o que impede a formação de gradientes de pressão significativos em seu interior, em todas as regiões do gaseificador. Esta pressão foi medida por LEE (1976), que levantou diferenças de pressão da ordem de apenas 300 Pa em partículas com 0,01m de espessura.

- O escoamento da fase sólida foi admitido unidimensional, na direção axial do gaseificador.

A descida do material sólido foi aproximadamente uniforme no gaseificador experimental, que dispunha de um sistema de descarga de cinzas excêntrico, o que provocava a movimentação da carga durante as operações de descarga, minimizando a ocorrência de engaiolamentos.

O diâmetro do gaseificador, além disso, era muitas vezes maior que a dimensão das partículas e a velocidade de descida de sólidos era muito baixa, da ordem de $1,7 \cdot 10^{-4}$ m/s.

- As forças de campo e as forças de superfície cisalhantes foram desprezadas.

No balanço de energia estão envolvidas reações químicas altamente exotérmicas e endotérmicas, taxas de transferência de calor elevadas, o que permite, por comparação, desprezar o trabalho das forças de campo e de atrito.

- As porosidades do carvão e do leito foram consideradas constantes.

A partícula de carvão apresenta uma porosidade elevada, através da qual permeiam reagentes e produtos gasosos. Na modelagem ela foi considerada constante ao longo das regiões de combustão e gaseificação. A porosidade do leito também foi considerada constante.

Estas duas hipóteses constituem aproximações menos precisas, na medida em que as reações de gaseificação, por serem volumétricas, acabam provocando uma variação na densidade do carvão e, portanto, na sua porosidade. Além disso, nas regiões de combustão e de gaseificação, ocorre uma variação muito intensa na dimensão das partículas, com a formação de cinzas livres. A proposição de correlação mais rigorosa para a determinação da porosidade, bem como a avaliação de seu efeito nas taxas de reação de gaseificação e de combustão é sugerida para trabalho futuro.

- Fase sólida contínua na direção z.

A fase sólida, no ensaio experimental, era descontínua, composta por cavacos de madeira empilhados aleatoriamente no interior do gaseificador. A fase sólida, na modelagem, foi considerada contínua ao longo da direção z, como se fosse constituída por um feixe de cavacos contínuos, se estendendo do topo à base do gaseificador. Cada cavaco contínuo seria formado por cavacos enfileirados um atrás do outro. Esta hipótese simplificadora facilitou a aplicação da equação de continuidade à esta fase.

Observe-se que as correlações empregadas para o cálculo dos coeficientes de película de transporte de calor e massa foram desenvolvidas para leitos de enchimento, com características semelhantes ao leito do gaseificador experimental.

b) Equação de Conservação da Espécie Química Aplicada à Fase Sólida nas Regiões de Combustão e Gaseificação.

Aplicando as hipóteses simplificadoras à equação de conservação das espécies químicas na fase sólida, eq. (3.5), ela se reduz a :

. Componentes sólidos :

$$\frac{d(\rho_i v_z)}{dz} = \sum_j v_{ij} R_j M_i \quad (3.9)$$

onde v_{ij} são os coeficientes estequiométricos dos componentes sólidos i nas reações heterogêneas j .

. Componentes gasosos :

$$\frac{dj_{iy}}{dy} = \sum_j v_{ij} R_j M_i \quad (3.10)$$

onde v_{ij} são os coeficientes estequiométricos dos componentes gasosos i nas reações heterogêneas j .

Estas duas equações refletem as hipóteses de que, dentro da fase sólida, os componentes sólidos somente se deslocam ao longo da altura do gaseificador e os componentes gasosos na direção transversal ao escoamento de sólidos.

A área ocupada pela fase sólida na seção transversal do gaseificador cilíndrico, A_{Ts} , é calculada a partir da equação :

$$A_{Ts} = \frac{\pi D_L^2}{4} (1 - \varepsilon_L) \quad (3.11)$$

e o número de cavacos contínuos, n_p , que ocupam a área A_{Ts} , pode ser calculado dividindo-se esta área pela área da seção transversal de um cavaco contínuo de largura x_p e espessura y_p .

$$n_p = \frac{A_{Ts}}{x_p y_p} \quad (3.12)$$

Integrando a equação de conservação das espécies químicas para componentes sólidos, eq. (3.9), ao longo da metade da seção transversal de um cavaco contínuo, obtém-se :

$$\int_{x=0}^{x=x_p} \int_{y=0}^{y=y_s} \frac{d(\rho_i v_z)}{dz} dx dy = \int_{x=0}^{x=x_p} \int_{y=0}^{y=y_s} \sum_j v_{ij} R_j M_i dx dy \quad (3.13)$$

ou

$$\frac{d(\rho_i v_z)}{dz} x_p y_s = x_p \sum_j v_{ij} M_i \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy \quad (3.14)$$

onde $y_s = \frac{y_p}{2}$

Observe-se que a integração de R_j em y ainda não pode ser efetuada, pois depende da concentração dos reagentes gasosos ao longo da espessura dos cavacos que, como será visto à frente, varia com y .

Multiplicando a equação (3.14) pelo número de cavacos contínuos n_p existentes na seção transversal do gaseificador, chega-se à expressão de variação da descarga F_i de uma dada espécie química sólida i ao longo da altura do gaseificador.

$$\frac{dF_i}{dz} = \frac{A_{Ts}}{y_s} \sum_j v_{ij} M_i \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy \quad (3.15)$$

Para a fase sólida como um todo a equação (3.15) pode ser escrita :

$$\frac{dF_s}{dz} = \frac{A_{Ts}}{y_s} \sum_i \sum_j v_{ij} M_i \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy \quad (3.16)$$

Assumindo que a difusão de cada componente gasoso i é nula no centro da seção transversal de um cavaco devido à sua simetria em relação ao plano xz em $y=0$, a equação de conservação de espécie química para componentes gasosos (3.10) pode ser integrada ao longo da metade da espessura do cavaco, y_s , resultando:

$$j_i|_{y=y_s} = \sum_{j=Rhet} v_{ij} M_i \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy \quad (3.17)$$

Esta expressão considera somente as reações heterogêneas j (R_{het}) que ocorrem dentro da fase sólida.

A variação da descarga de um dado componente gasoso i ao longo da altura do gaseificador, na fase gasosa, provocada pelo fluxo de gases que atravessa a

interface sólido-gás calculada em (3.17), pode ser calculada multiplicando-se este fluxo pela variação da área total dos cavacos, perpendicular ao fluxo de gases, com a altura do leito. No caso de partículas planas este termo é igual a A_{Ts}/y_s .

$$\frac{dF_i}{dz} = \frac{A_{Ts}}{y_s} j_i \Big|_{y=y_s} \quad (3.18)$$

Substituindo o fluxo mássico do componente gasoso i que sai pela superfície da partícula, calculado em (3.17), na equação (3.18) chega-se a :

$$\frac{dF_i}{dz} = \frac{A_{Ts}}{y_s} \sum_{j=Rhet} v_{ij} M_i \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy \quad (3.19)$$

A variação da descarga da fase gasosa como um todo, F_g , ao longo da altura do gaseificador, devido aos componentes gasosos i trocados com a fase sólida fica :

$$\frac{dF_g}{dz} = \frac{A_{Ts}}{y_s} \sum_i \sum_{j=Rhet} v_{ij} M_i \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy \quad (3.20)$$

c) Equação de Energia Aplicada à Fase Sólida nas Regiões de Combustão e Gaseificação.

A partir das hipóteses simplificadoras apresentadas, a equação geral da energia (3.7) se reduz a :

Integrando esta equação ao longo da seção transversal de um cavaco contínuo e multiplicando pelo número de cavacos contínuos existentes na seção transversal do gaseificador, obtém-se :

$$F_s C_{ps} \frac{dT_s}{dz} = A_{Ts} \left[-\frac{dq_{rz}}{dz} + \frac{d}{dz} \left(K \frac{dT_s}{dz} \right) \right] - \frac{A_{Ts}}{y_s} \sum_i (\bar{H}_i + H_i^0) \int_{y=0}^{y=y_s} \sum_j v_{ij} R_j dy \quad (3.24)$$

Nesta equação o subscrito i se refere aos componentes sólidos e gasosos presentes na fase sólida. Separando o último termo do lado direito da equação em termos dos componentes sólidos e gasosos, obtém-se :

$$F_s C_{ps} \frac{dT_s}{dz} = A_{Ts} \left[-\frac{dq_{rz}}{dz} + \frac{d}{dz} \left(K \frac{dT_s}{dz} \right) \right] - \frac{A_{Ts}}{y_s} \left(\sum_{i=\text{gasoso}} \bar{H}_i \sum_j v_{ij} \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy \right. \\ \left. + \sum_{i=\text{gasoso}} H_i^0 \sum_j v_{ij} \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy + \sum_{i=\text{sólido}} \bar{H}_i \sum_j v_{ij} \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy \right) \quad (3.25)$$

As entalpias molares de formação dos componentes sólidos não aparecem nesta equação porque são nulas. As integrais correspondentes às reações heterogêneas são calculadas mais adiante.

A equação (3.25) representa o balanço de energia num elemento de volume de altura dz da fase sólida, nas regiões de gaseificação e combustão. Ela permite calcular a variação de temperatura da fase sólida ao longo destas regiões do gaseificador, desde que se conheça as condições de contorno.

Os dois primeiros termos do lado direito da equação se referem à troca de calor por radiação e condução, na direção z; o terceiro termo à troca de calor pela difusão de componentes gasosos através da interface sólido-gás; o quarto termo à

entalpia da reação heterogênea e, o último termo, à variação de energia devido à variação da massa dos componentes sólidos.

Apesar da fase sólida ser considerada isotérmica ao longo da espessura, ela pode ter temperatura diferente da fase gasosa, ocorrendo uma troca de calor, por convecção, entre as duas fases. Para levar este efeito em consideração, deve-se incluir na equação (3.25) o seguinte termo :

$$q_{cy} = -h(T_s - T_g) \quad (3.26)$$

tal que, o calor trocado num elemento de área de superfície de um cavaco, de largura x_p e altura dz , seja igual a :

$$dQ_{p,y} = q_{cy} x_p dz \quad (3.27)$$

Multiplicando-se esta equação pelo número de cavacos existentes na seção transversal do gaseificador, considerando que a placa tem duas faces perpendiculares ao fluxo de calor, pode-se obter a variação do calor trocado entre a fase gasosa e a fase sólida, por convecção, ao longo da altura do gaseificador nesta região :

$$\frac{dQ_y}{dz} = \frac{A_{Ts}}{y_s} q_{cy} \quad (3.28)$$

ou, em função do coeficiente de película de transferência de calor h :

$$\frac{dQ_y}{dz} = -\frac{A_{Ts}}{y_s} h(T_s - T_g) \quad (3.29)$$

Acrescentando este termo à eq. (3.25) e reagrupando, obtém-se :

$$F_s c_{ps} \frac{dT_s}{dz} = A_{Ts} \left[-\frac{dq_{rz}}{dz} + \frac{d}{dz} \left(K \frac{dT_s}{dz} \right) \right]$$

$$-\frac{A_{Ts}}{y_s} \left[\sum_i \sum_j v_{ij} \bar{H}_i \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy + \sum_{i=\text{gasoso}} \sum_j v_{ij} H_i^0 \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy + h(T_s - T_g) \right] \quad (3.30)$$

Observe-se que, nesta equação, a entalpia molar específica $\bar{H}_i$ do componente gasoso i deve ser calculada a T_g se o componente for proveniente da fase gasosa, e a T_s , se da fase sólida. Devido à hipótese de seção transversal isotérmica nesta região, $\bar{H}_i$, para o componente sólido i , deve ser calculada sempre a T_s .

O fluxo de calor por radiação num meio poroso, q_{rz} , segundo TIEN (1988), pode ser representado, de uma forma simplificada, por uma expressão do tipo da equação de condução de calor .

$$q_{rz} = -K_r \frac{dT_s}{dz} \quad (3.31)$$

$$\text{com } K_r = \frac{4\sigma_s T_s^3 y_p}{2 - \epsilon_s}$$

onde : ϵ_s = emissividade da fase sólida,

T_s = temperatura da fase sólida,

σ = constante de Stefan-Boltzmann.

K_r é interpretada como uma condutividade térmica equivalente e y_p como sendo igual à dimensão característica de partícula que, no caso de cavacos, é a espessura inicial do cavaco.

Substituindo a equação (3.31) na equação (3.30), obtém-se :

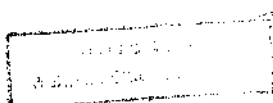
$$F_s c_{ps} \frac{dT_s}{dz} = A_{Ts} \left[\frac{d}{dz} (K_r + K) \frac{dT_s}{dz} \right] - \frac{A_{Ts}}{y_s} \left[\sum \sum v_{ij} \bar{H}_i \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy + \sum_{i=\text{gasoso}} \sum_j v_{ij} H_i^0 \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy + h(T_s - T_g) \right] \quad (3.32)$$

As condições de contorno empregadas para a resolução desta equação diferencial de segunda ordem foram as seguintes :

- $\frac{dT_s}{dz} = 0$ em $z=0$ (base do gaseificador);
- T_s em $z=0$ é tal que $\frac{dT_s}{dz} < 0$ para $z > 0$ nas regiões de combustão e gaseificação.

A primeira condição supõe que a condutividade térmica das cinzas, presentes nas cotas inferiores a $z=0$, abaixo do ponto de entrada de ar, é zero, atuando como um isolante térmico perfeito.

A temperatura da fase sólida T_s , em $z=0$, é obtida a partir de um processo iterativo. Parte-se de uma dada temperatura a partir da qual resultam derivadas dT_s/dz positivas em $z > 0$ até atingir uma temperatura a partir da qual as derivadas, para $z > 0$, sejam sempre negativas. Para valores superiores à esta temperatura ocorre uma elevação contínua de temperatura na fase sólida a partir de uma determinada cota, o que não tem significado físico. Temperaturas muito mais



baixas do que a obtida na reiteração levam à extinção prematura das reações de combustão e gaseificação no leito, resultando em taxas de conversão de carvão em gás também baixas.

3.3.2. Modelagem da Fase Sólida nas Regiões de Pirólise, Secagem e Aquecimento.

Nas regiões de pirólise, secagem e aquecimento os cavacos não mais são considerados isotérmicos, havendo a necessidade de realizar balanços de massa e energia nas partículas que compõem a fase sólida, nas direções axial e transversal. Observe-se que, nas regiões de combustão e gaseificação, o balanço de energia na partícula é feito somente na direção axial.

A biomassa, da mesma forma que no modelo de SOUZA SANTOS (1985), é considerada constituída por quatro componentes : carbono fixo, matéria volátil, umidade e cinzas. A matéria volátil pode se decompor em gases combustíveis e vapor de alcatrão. Este vapor não sofre decomposição tanto no interior da fase sólida como na fase gasosa. Esta hipótese foi admitida para facilitar a determinação da composição da fase gasosa no topo do leito, que é conseguida sem que se tenha de recorrer a um processo iterativo.

Na realidade o alcatrão pode se decompor dentro da fase sólida, resultando na deposição de resíduo carbonoso no interior da partícula e na geração adicional de gases. A taxa de decomposição do alcatrão depende da velocidade de aquecimento e das dimensões das partículas. Velocidades elevadas de aquecimento e dimensões reduzidas tendem a reduzir a decomposição interna de alcatrão, levando a rendimentos baixos de carbono fixo. Velocidades reduzidas de

aquecimento e grandes dimensões tendem a favorecer a decomposição interna do alcatrão, elevando o rendimento de carbono fixo. O alcatrão também pode se decompor na fase gasosa, que se torna significativa a temperaturas acima de 873 K.

As reações de pirólise e a secagem podem ocorrer simultaneamente, dependendo da geometria das partículas e das condições de aquecimento.

a) Hipóteses Simplificadoras.

Algumas das hipóteses simplificadoras assumidas nas regiões de pirólise, secagem e aquecimento diferem das adotadas nas regiões de combustão e gaseificação. As hipóteses que foram mantidas são as seguintes :

- Regime permanente;
- Gaseificador isobárico;
- Escoamento unidimensional da fase sólida na direção axial;
- Forças de campo e de atrito são desprezíveis;
- Transporte por convecção e difusão dos componentes gasosos na direção axial da fase sólida nulo;
- Porosidade do leito e das partículas constante.

As hipóteses complementares são:

- O transporte por difusão de componentes gasosos na direção y é desprezível frente ao transporte convectivo.

Como ficou evidenciado na análise dos tempos característicos, apresentada no Capítulo 2.1, para partículas com dimensões da ordem de 0,015 m, a convecção é preponderante sobre a difusão no transporte dos produtos de pirólise gasosos do interior para a superfície das partículas. Nas regiões de combustão e gaseificação o mecanismo preponderante é a difusão (WEN e LEE, 1979).

- Os cavacos são isotérmicos ao longo da sua largura (x_p).

No caso de cavacos de madeira a área da seção perpendicular à direção x , $\Delta z.y_p$, é desprezível em relação à área da seção perpendicular à direção y , $\Delta z.x_p$. Desta forma a taxa de transferência de calor na direção x pode ser desprezada e a temperatura ser considerada constante nesta direção.

- A transferência de calor por condução e radiação na direção axial (eixo z) é desprezível.

Os cavacos de biomassa são descontínuos, existindo um espaço entre eles, ocupado por fase gasosa (o modelo os considera contínuos) de baixa condutividade. Além disso, na região de pirólise, há uma liberação intensa de alcatrão, que forma uma neblina pouco transparente à radiação ao redor dos cavacos.

- As taxas das reações heterogêneas e homogêneas de gaseificação são nulas.

As cinéticas das reações de gaseificação, homogêneas e heterogêneas, nas temperaturas em que as etapas de aquecimento, secagem e pirólise se

desenvolvem em um gaseificador contracorrente, normalmente abaixo de 800 K, são muito lentas, podendo ser desprezadas. A vantagem deste procedimento está no aumento da velocidade da simulação nesta região.

A reação de decomposição de alcatrão, que apresenta taxa elevada até temperaturas da ordem de 600 K, não é considerada neste modelo por motivo já exposto.

b) Equação da Conservação de Espécies Químicas Aplicada à Fase Sólida nas Regiões de Pirólise, Secagem e Aquecimento.

A equação de conservação de espécies químicas para os componentes sólidos da fase sólida, nestas regiões, após a aplicação das hipóteses simplificadoras, é semelhante à equação (3.9), obtida na região de combustão e gaseificação.

$$\frac{d(\rho_i v_z)}{dz} = \sum_j v_{ij} R_j M_i \quad (3. 33)$$

Por outro lado, com a hipótese de haver predominância de transporte convectivo sobre o difusivo nestas regiões e a de que os componentes gasosos somente se deslocam na direção y , a equação de continuidade para componentes gasosos na fase sólida se reduz a :

$$\frac{d(\rho_i v_y)}{dy} = \sum_j v_{ij} R_j M_i \quad (3. 34)$$

Para os componentes sólidos e gasosos como um todo, presentes na fase sólida, as equações (3.33) e (3.34) podem ser escritas :

$$\frac{d(\rho_s v_z)}{dz} = \sum_{i=14}^{19} \sum_j v_{ij} R_j M_i \quad (3.35)$$

e

$$\frac{d(\rho_g v_y)}{dy} = \sum_{i=1}^{13} \sum_j v_{ij} R_j M_i \quad (3.36)$$

onde j representa as reações de pirólise e secagem.

A partir da aplicação da lei de conservação de massa em um elemento de volume da fase sólida, segue :

$$\frac{\partial(\rho_s v_z)}{\partial z} = - \frac{\partial(\rho_g v_y)}{\partial y} \quad (3.37)$$

ou

$$\sum_{i=14}^{19} \sum_j v_{ij} R_j M_i + \sum_{i=1}^{13} \sum_j v_{ij} R_j M_i = 0 \quad (3.38)$$

c) Equação da Energia Aplicada à Fase Sólida nas Regiões de Pirólise, Secagem e Aquecimento.

Levando em conta as hipóteses simplificadoras, a equação de conservação de energia fica :

$$\rho_s c_{ps} v_z \frac{\partial T_s}{\partial z} = -\rho_g c_{pg} v_y \frac{\partial T_s}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial T_s}{\partial y} \right) - \sum_i \sum_j (\bar{H}_i + H_i^0) v_{ij} R_j \quad (3.39)$$

onde o primeiro termo do lado direito da equação representa a variação de energia associada ao transporte convectivo de massa na direção y, o segundo a condução de calor através da fase sólida e o terceiro a reação de pirólise.

Substituindo as equações de continuidade (3.33) e (3.34) no último termo desta equação, resulta:

$$\begin{aligned} \rho_s c_{ps} v_z \frac{\partial T_s}{\partial z} = & -\rho_g c_{pg} v_y \frac{\partial T_s}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial T_s}{\partial y} \right) - \sum_{i=\text{gasosos}} \bar{H}_i \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\rho_i v_y}{M_i} \right) \\ & - \sum_{i=\text{gasosos}} \bar{H}_i^0 \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\rho_i v_y}{M_i} \right) - \sum_{i=\text{sólidos}} \bar{H}_i \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\rho_i v_z}{M_i} \right) \end{aligned} \quad (3.40)$$

A entalpia de formação dos compostos sólidos não aparece nesta última equação porque é considerada nula. Na realidade esta hipótese somente é válida para elementos químicos não combinados e é adotada neste trabalho como uma aproximação.

A equação (3.40) pode ainda ser escrita em termos de fluxo mássico e entalpias médias.

O fluxo dos produtos gasosos provenientes da pirólise e da secagem pode ser representado pela equação :

$$W_g = \rho_g v_y \quad (3.41)$$

com a derivada em y dada pela equação :

$$\frac{d(W_g)}{dy} = \sum_{i=1}^{13} \sum_j v_{ij} R_j M_i \quad (3.42)$$

O fluxo de componentes sólidos pode ser representado pela equação :

$$W_s = \rho_s v_z \quad (3.43)$$

com a derivada em z :

$$\frac{d(W_s)}{dz} = \sum_{i=14}^{19} \sum_j v_{ij} R_j M_i \quad (3.44)$$

Os fluxos de energia, associados aos fluxos de massa de produtos gasosos e de compostos sólidos, podem ser escritos das seguintes formas :

$$H_g \frac{\partial W_g}{\partial y} = \sum_{i=1}^{13} \bar{H}_i \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\rho_i v_y}{M_i} \right) \quad (3.45)$$

e

$$H_s \frac{\partial W_s}{\partial z} = \sum_{i=14}^{19} \bar{H}_i \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\rho_i v_z}{M_i} \right) \quad (3.46)$$

A entalpia da reação de pirólise, em termos de fluxos, pode ser representada pela equação :

$$H_p \frac{\partial W_g}{\partial y} = \sum_{i=1}^{13} \overline{H}_i^0 \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\rho_i v_{iy}}{M_i} \right) \quad (3.47)$$

onde : H_p = entalpia de reação de pirólise,

H_s = entalpia média dos componentes sólidos,

H_g = entalpia média dos produtos gasosos de pirólise e secagem e

j = reação de pirólise e secagem.

Substituindo estas relações na equação (3.40), obtém-se :

$$\begin{aligned} W_s c_{ps} \frac{\partial T_s}{\partial z} = & -W_g c_{pg} \frac{\partial T_s}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial T_s}{\partial y} \right) - H_g \frac{\partial W_g}{\partial y} \\ & - H_s \frac{\partial W_s}{\partial z} - H_p \frac{\partial W_g}{\partial y} \end{aligned} \quad (3.48)$$

O fluxo mássico de gás W_g pode ser dividido em dois fluxos : um de produtos de pirólise, W_{gp} , e outro de vapor de água, proveniente da secagem, W_{gv} . Introduzindo estes termos na equação, após rearranjo, ela fica :

$$\begin{aligned} W_s c_{ps} \frac{\partial T_s}{\partial z} + H_s \frac{\partial W_s}{\partial z} = & -W_{gp} c_{pg} \frac{\partial T_s}{\partial y} - W_{gv} c_{pv} \frac{\partial T_s}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial T_s}{\partial y} \right) \\ & - H_{gp} \frac{\partial W_{gp}}{\partial y} - H_{gv} \frac{\partial W_{gv}}{\partial y} - H_p \frac{\partial W_{gp}}{\partial y} \end{aligned} \quad (3.49)$$

A partir das equações (3.38), (3.41) e (3.43) pode-se escrever que:

$$\frac{\partial W_s}{\partial z} = - \frac{\partial W_{gp}}{\partial y} \quad (3.50)$$

e, a partir da hipótese de que o fluxo de vapor d'água se forma na frente de secagem, vale a relação :

$$\left. \frac{\partial W_{gv}}{\partial y} \right|_{y=y_{fs}} = 0 \quad (3.51)$$

No caso de partículas com geometria diferente da geometria plana dos cavacos, por exemplo, cilíndrica ou esférica, esta derivada não é nula, devendo ser considerada na eq. (3.49). Substituindo estas duas últimas relações em (3.49), obtém-se :

$$\begin{aligned} W_s c_{ps} \frac{\partial T_s}{\partial z} = & -W_{gp} c_{pg} \frac{\partial T_s}{\partial y} - W_{gv} c_{pv} \frac{\partial T_s}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial T_s}{\partial y} \right) \\ & - (H_{gp} + H_p - H_s) \frac{\partial W_{gp}}{\partial y} \end{aligned} \quad (3.52)$$

Esta equação diferencial parcial aplicada a regiões onde **somente ocorre pirólise, sem secagem ($W_{gv}=0$)**, pode ser integrada a partir das condições de contorno :

- Simetria dos cavacos em relação ao plano xz em $y=0$:

$$\frac{\partial T_s}{\partial y} = 0 \text{ para } y = 0;$$

- Balanço de energia na superfície do cavaco :

$$-K \frac{\partial T_s}{\partial y} = h(T_s - T_g) \text{ para } y=y_s;$$

- Temperatura do cavaco alimentado no topo do forno igual à temperatura ambiente:

$$T_s = T_a \text{ em } z = Z_L$$

O fluxo mássico de produtos de pirólise pode ser calculado a partir da equação (3.42) :

$$\frac{dW_{gp}}{dy} = \sum_i v_{ij} R_j M_i \quad (3.53)$$

onde : j = reação de pirólise e

i = produtos de pirólise.

Esta equação diferencial pode ser resolvida a partir da condição de simetria em relação ao plano xz, passando em $y=0$, que impõe a condição adicional:

$$W_{gp} = 0 \text{ em } y = 0.$$

Na região onde **ocorre pirólise e secagem**, as condições de contorno da equação de energia se modificam, passando a ser as seguintes :

- A temperatura da frente de secagem é igual à temperatura de saturação da umidade livre da biomassa;

$T = T_B$, temperatura de saturação da umidade, em $y = y_{fs}$, cota da frente de secagem na direção y.

- Balanço de energia na superfície do cavaco :

$$-K \frac{\partial T_s}{\partial y} = h(T_s - T_g) \text{ para } y=y_s, \text{ cota da superfície do cavaco.}$$

- A reação de pirólise é nula na região úmida :

$$W_{gp}=0 \text{ para } y \leq y_{fs}$$

- A mudança de fase da umidade somente acontece na frente de secagem :

$$W_{gv} = 0 \text{ para } y \leq y_{fs}$$

O fluxo de vapor gerado na frente de secagem é função da taxa de transferência de calor nesta frente e pode ser calculado através da equação :

$$W_{gv} = - \frac{K \frac{\partial T_s}{\partial y} \Big|_{y=y_{fs}}}{h_v} \quad (3.54)$$

onde h_v é a entalpia latente de vaporização da água.

Observe-se que a temperatura da frente de secagem é igual à temperatura de saturação de vapor d'água, definida pela pressão existente dentro do gaseificador, não sendo obtida, portanto, através do balanço de energia.

A condutividade térmica e o calor específico da fase sólida podem variar significativamente ao longo da espessura da partícula em função de mudanças de composição que ocorrem na fase sólida durante a pirólise e secagem. Estes parâmetros são calculados a partir de calores específicos e condutividades dos

materiais constituintes da biomassa, ponderados pela fração mássica de cada um, como detalhado no Anexo A.

Na região de aquecimento, onde considera-se que não ocorre secagem nem pirólise, a equação de energia da fase sólida se reduz a :

$$W_s c_{ps} \frac{\partial T_s}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial T_s}{\partial y} \right) \quad (3.55)$$

Esta equação pode ser resolvida a partir das condições de contorno :

- A temperatura da fase sólida, no topo do gaseificador, é igual à temperatura ambiente :

$$T_s = T_a \text{ para } z = Z_L$$

- Balanço de energia na superfície do cavaco :

$$-K \frac{\partial T_s}{\partial y} = h(T_s - T_g) \text{ para } y = y_s$$

- Simetria do perfil de temperatura em relação ao plano xz em $y=0$:

$$\frac{\partial T_s}{\partial y} = 0 \text{ para } y = 0$$

onde : T_a = temperatura ambiente e

Z_L = cota do topo do leito de cavacos.

3.4. Modelagem da Fase Gasosa.

Na modelagem da fase gasosa emprega-se um modelo único para todas as regiões existentes no gaseificador. As hipóteses simplificadoras adotadas são apresentadas a seguir.

3.4.1. Hipóteses Simplificadoras.

As hipóteses de regime permanente, fase contínua, reator isobárico e escoamento unidimensional e suas justificativas, adotadas para a fase sólida, também são assumidas para a fase gasosa. Considerou-se ainda que :

- A difusão de calor e massa nas direções axial e radial é nula.

A velocidade dos gases na direção axial é relativamente alta, garantindo um escoamento em regime turbulento. Desta forma a temperatura e a composição da fase gasosa podem ser consideradas constantes ao longo da seção transversal do gaseificador. Na interface partículas/gás, no entanto, ocorre troca de calor e massa

na direção radial, em função da existência de gradientes de temperatura e de concentração entre a superfície das partículas e a fase gasosa.

Na interface parede do forno/gás também ocorre troca de calor na direção radial. Esta última hipótese implica em atribuir as perdas de energia pelas paredes do gaseificador somente à fase gasosa, embora a fase sólida também troque calor com a parede do gaseificador, por condução e radiação.

3.4.2. Equação de Conservação de Espécies Químicas Aplicada à Fase Gasosa.

A partir da equação de continuidade (3.5) e das hipóteses simplificadoras adotadas, a equação de continuidade para a espécie química i , na fase gasosa, fica :

$$\frac{d(\rho_i v_z)}{dz} = \sum_{j=Rhom} v_j R_j M_i \quad (3. 56)$$

onde Rhom representa as reações homogêneas que ocorrem na fase gasosa.

Esta equação pode ser integrada ao longo da área ocupada pela fase gasosa numa seção transversal do gaseificador, A_{Tg} , calculada multiplicando-se a área da seção transversal pela porosidade do leito :

$$A_{Tg} = \frac{\pi D_L^2}{4} \epsilon_L \quad (3. 57)$$

Como a porosidade do leito é considerada constante ao longo da altura do gaseificador, multiplicando a equação (3.56) por esta área obtém-se a variação da descarga do componente gasoso i , F_i , na direção z :

$$\frac{dF_i}{dz} = A_{Tg} \sum_{j=Rhom} v_{ij} R_j M_i \quad (3.58)$$

Por outro lado, a espécie química gasosa i gerada na fase sólida através das reações heterogêneas, R_{het} , é transportada para a fase gasosa através da interface sólido-gás. Este troca pode ser calculada pela equação (3.19) que, adicionada à equação (3.58), leva à equação :

$$\frac{dF_i}{dz} = A_{Tg} \sum_{j=Rhom} v_{ij} R_j M_i + \frac{A_{Ts}}{y_s} \sum_{j=Rhet} v_{ij} M_i \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy \quad (3.59)$$

que representa a variação da descarga total do componente i ao longo da altura do gaseificador.

Para a fase gasosa como um todo, a equação (3.59) pode ser escrita :

$$\frac{dF_g}{dz} = A_{Tg} \sum_{i=1}^{13} \sum_{j=Rhom} v_{ij} R_j M_i + \frac{A_{Ts}}{y_s} \sum_{i=1}^{13} \sum_{j=Rhet} v_{ij} M_i \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy \quad (3.60)$$

3.4.3. Equação da Energia Aplicada à Fase Gasosa.

A equação de energia (3.7) aplicada a fase gasosa, levando em conta as hipóteses simplificadoras, se reduz a :

$$\rho_g c_{pg} v_z \frac{dT_g}{dz} = -\sum_i (\bar{H}_i + \bar{H}_i^0) \sum_j v_{ij} R_j \quad (3.61)$$

Multiplicando esta equação pela área da seção transversal do gaseificador ocupada pela fase gasosa, obtém-se :

$$F_g c_{pg} \frac{dT_g}{dz} = -A_{Tg} \sum_i (\bar{H}_i + \bar{H}_i^0) \sum_j v_{ij} R_j \quad (3.62)$$

Este balanço de energia é feito somente na fase gasosa. Ele não leva em conta a troca de calor na interface sólido-gás e na parede do gaseificador por convecção, bem como a troca de calor associada ao transporte de massa. Estes termos, calculados a seguir, devem ser acrescentados à eq. (3.62).

a) Cálculo do calor trocado por convecção entre a fase gasosa e a sólida.

A troca de calor entre a fase sólida e a gasosa pode ser calculada pela equação (3.29) com o sinal trocado por se tratar de outra fase.

$$\frac{dQ_y}{dz} = \frac{A_{Ts}}{y_s} h (T_s - T_g) \quad (3.63)$$

b) Cálculo do calor trocado com a parede do gaseificador.

No cálculo do fluxo de calor trocado entre a fase gasosa e a parede do gaseificador admite-se que a temperatura da superfície interna do gaseificador seja igual à da fase gasosa. Esta hipótese foi possível porque o gaseificador experimental de referência era revestido com material refratário, com resistência térmica dominante. Desta forma o fluxo de calor que atravessa a parede é dado por:

$$q_{pi} = \frac{K_{pi}}{e} (T_g - T_{pe}) \quad (3.64)$$

onde : K_{pi} = condutividade térmica de refratário,

e = espessura de refratário e

T_{pe} = temperatura da parede externa do gaseificador.

O fluxo de calor entre a parede externa do gaseificador e o meio ambiente é dado por :

$$q_{pe} = h_{pe} (T_{pe} - T_a) \quad (3.65)$$

onde : h_{pe} = coeficiente de película de transferência de calor por convecção entre a parede externa do gaseificador e o meio ambiente e

T_a = temperatura do meio ambiente.

A partir da hipótese de regime permanente e das equações (3.64) e (3.65) pode-se calcular T_{pe} através de um processo iterativo. Multiplicando a equação (3.65) por um elemento de área da parede interna do gaseificador, obtém-se a variação das perdas de calor pelas paredes com a altura do gaseificador :

$$\frac{dQ_{pe}}{dz} = \pi D_L h_{pe} (T_{pe} - T_a) \quad (3.66)$$

c) Cálculo do calor trocado por difusão de massa entre a fase gasosa e a sólida.

A partir da equação de energia calculada para a fase sólida nas regiões de combustão e gaseificação, eq. (3.21), pode-se obter a variação em z do calor trocado entre as fases sólida e gasosa, associado ao transporte de massa:

$$\frac{dQ_m}{dz} = \frac{A_{Ts}}{y_s} \sum_i \sum_j v_{ij} \bar{H}_i \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy \quad (3.67)$$

onde : i = componentes gasosos e

j = reações heterogêneas.

Nas regiões de combustão e gaseificação, no caso do coeficiente estequiométrico de um dado componente gasoso i ser negativo, isto é, quando o componente i se difunde para dentro da fase sólida, a entalpia específica molar deste componente é calculada na temperatura T_g . Se positivo, o componente sai da fase sólida e a entalpia molar é calculada a T_s . Nas regiões de aquecimento,

secagem e pirólise, onde a partícula sólida não é isotérmica, T_s corresponde à temperatura da superfície externa da partícula.

d) Equação de energia da fase gasosa.

Acrescentando os termos de troca de calor obtidos nos itens anteriores à equação (3.62), obtém-se :

$$F_g c_{pg} \frac{dT_g}{dz} = -A_{Tg} \sum_i (\bar{H}_i - \bar{H}_i^0) \sum_{j=R_{hom}} v_{ij} R_j + \frac{A_{Ts}}{y_s} h (T_s - T_g) +$$

$$+ \pi D_L h_{pe} (T_{pe} - T_a) + \frac{A_{Ts}}{y_s} \sum_i \sum_{j=R_{het}} v_{ij} \bar{H}_i \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy \quad (3.68)$$

Esta equação permite calcular a temperatura da fase gasosa ao longo da altura do leito em todas as regiões do gaseificador.

Capítulo 4

4. MODELAGEM DAS REAÇÕES QUÍMICAS

4.1. *Reações Químicas Consideradas.*

No modelo de gaseificação de leito movente contracorrente são consideradas 12 reações globais, sendo 6 heterogêneas e 6 homogêneas.

Os componentes são numerados de 1 a 19, sendo 13 gasosos (componentes 1 a 13) e 6 sólidos (componentes 14 a 19). A identificação dos componentes é apresentada na Tabela 4.1.

A composição da fase sólida pode ser expressa tanto em termos da análise elementar, com teores de C, H, O, N, S, como em termos da análise imediata, com teores de carbono fixo, voláteis, umidade e cinza.

Tabela 4.1 Identificação dos componentes considerados no modelo.

No	Componente	No	Componente	No	Componente	No	Componente
1	CO	6	C ₂ H ₆	11	NO	16	O
2	CO ₂	7	H ₂ S	12	SO ₂	17	N
3	N ₂	8	O ₂	13	Alc	18	S
4	H ₂	9	H ₂ O	14	C	19	Cinza
5	CH ₄	10	NH ₃	15	H		

Obs : Alc = alcatrão na fase gasosa.

4.2. Reações Heterogêneas.

O modelo de combustão e gaseificação de biomassa adotado é o de núcleo exposto, no qual não se considera a presença de uma camada de cinza envolvendo a partícula. Isto se deve ao baixo teor de cinza normalmente encontrado em biomassas. Esta cinza, além disso, é muito friável, desprendendo-se com facilidade da superfície das partículas.

As reações heterogêneas ocorrem no interior da fase sólida, principalmente nas regiões de combustão e gaseificação. Os reagentes gasosos, provenientes da fase gasosa, têm de atravessar a camada limite existente em torno das partículas sólidas, difundir-se através dos poros e reagir com os componentes sólidos. A concentração dos compostos gasosos pode variar ao longo da partícula, mas a dos

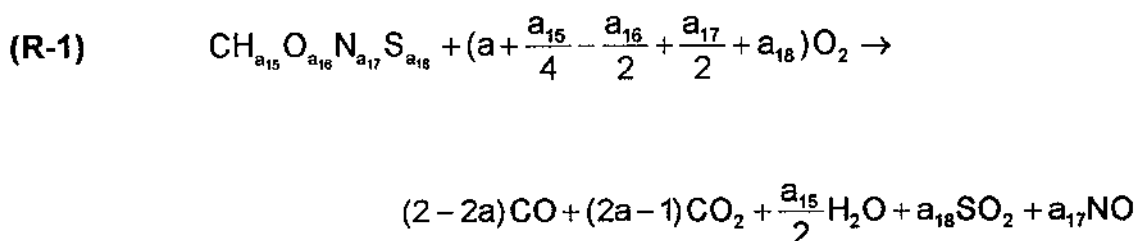
componentes sólidos permanece constante, segundo hipótese simplificadora assumida anteriormente.

A reação de combustão, por ser muito rápida, não permite que o oxigênio penetre em profundidade na partícula, sendo totalmente consumido nas camadas superficiais. Esta reação é um exemplo típico de reação de superfície.

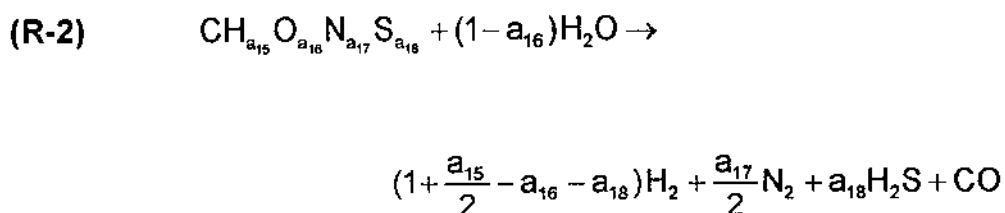
O carbono fixo é representado pela fórmula genérica $\text{CH}_{a_{15}}\text{O}_{a_{16}}\text{N}_{a_{17}}\text{S}_{a_{18}}$, com molaridade 1 para o carbono. O método de determinação da molaridade dos demais componentes (a_{15} a a_{18}) em relação à do carbono é apresentada mais adiante.

As reações heterogêneas consideradas são :

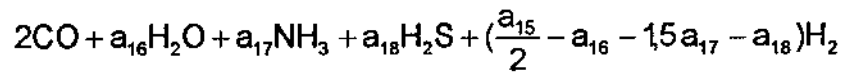
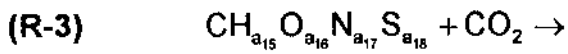
- Combustão de carbono fixo;



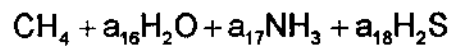
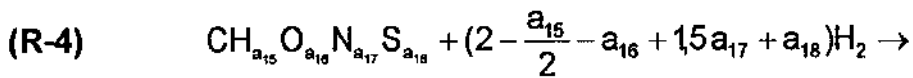
- Gaseificação de carbono fixo com vapor d'água;



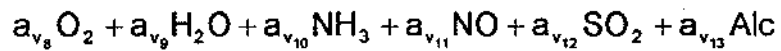
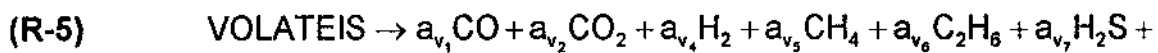
- Gaseificação de carbono fixo com dióxido de carbono;



- Hidrogenação de carbono fixo;



- Pirólise de matéria volátil;



- Secagem;



A reação (R-1) representa a reação de combustão do carbono fixo na base do gaseificador. O coeficiente a , em (R-1), define a relação entre o CO e o CO₂ formados durante a combustão do carbono fixo. Este coeficiente, obtido a partir de ARTHUR (1951) e ROSSBERG (1956), é função somente da temperatura da fase sólida, dado pela relação :

$$a = \frac{2+b}{2b+2} \quad (4.1)$$

onde :

$$b = 2500 \exp\left(-\frac{6240}{T_s}\right).$$

Observe-se que quanto mais elevada é a temperatura T_s , mais o coeficiente a tende ao valor 0,5, correspondendo à geração de CO puro. Para temperaturas baixas o coeficiente tende a 1, correspondendo à geração de CO_2 .

A reação de combustão (R-1), além de muito exotérmica, é muito rápida, provocando uma queda acentuada no teor de oxigênio da fase gasosa na região de combustão do gaseificador. A liberação de energia, nesta região, é muito intensa e a troca de calor por convecção com a fase gasosa, juntamente com as reações endotérmicas de gaseificação, não são suficientes para dissipá-la. Para evitar uma elevação abrupta da temperatura da fase sólida houve a necessidade de levar em conta um mecanismo adicional de dissipação de calor.

Este mecanismo foi a troca de calor por radiação e condução na direção axial do reator. Sem este mecanismo, as temperaturas da fase sólida tendem a se elevar excessivamente nesta região, muito acima da temperatura de fusão das cinzas, fato não observado nos ensaios experimentais realizados no IPT.

As reações de gaseificação (R-2) e (R-3) são endotérmicas e ocorrem simultaneamente à reação de combustão. As cinéticas destas reações são muito mais lentas que a de combustão e são as principais responsáveis pelo resfriamento da fase gasosa na região de gaseificação.

A reação (R-4) é muito lenta e é responsável pela formação de metano nestas regiões. Esta reação tem pouca influência na formação de metano em gaseificadores atmosféricos gaseificando biomassa, uma vez que a maior parte do metano encontrado nos gases é proveniente da pirólise de biomassa e da decomposição secundária de alcatrão.

A reação (R-5) corresponde à pirólise da fração volátil da biomassa em gases e vapor de alcatrão. O presente modelo não considera a decomposição de alcatrão dentro e fora da partícula, o que pode ser objeto de desenvolvimento futuro. A cinética de decomposição da matéria volátil foi obtida a partir de ensaios experimentais com madeira e é tratada como sendo de primeira ordem em relação à matéria volátil :

$$R_{12} = k_{12} C_{vol} \quad (4. 2)$$

onde C_{vol} é a concentração molar de matéria volátil.

A “reação” (R-6) não é uma reação química, representando, na realidade, uma mudança de fase. Esta mudança de fase pode ocorrer simultaneamente à reação de pirólise e é responsável pelo seu retardamento, uma vez que a evaporação da água, mais a passagem do vapor pela matriz sólida, tendem a resfriar a partícula de biomassa.

4.2.1. Determinação da Molaridade dos Elementos Constituintes do Carbono Fixo e do Alcatrão.

Os coeficientes molares a_i dos elementos componentes do carvão nas reações (R-1) a (R-4), com i variando de 14 a 18, foram determinados a partir de análise elementar de carvão vegetal obtido em ensaios de pirólise de cavacos de *Eucalyptus* realizados no IPT (1979).

Estes ensaios foram feitos em retorta metálica, aquecida externamente por resistências elétricas, com percolação de nitrogênio no seu interior. Os gases eram resfriados à saída da retorta e os condensados formados recolhidos. Os condensados puderam ser divididos em duas frações, uma constituída exclusivamente por água, e outra por compostos orgânicos, denominada alcatrão.

Tabela 4.2 Rendimento de produtos de pirólise de cavacos de *Eucalyptus* obtidos em retorta metálica.

Produtos de Pirólise	Rendimento (% em massa,b.s.)
Carbono Fixo	28,6
Gases	22,4
Alcatrão	20,3
Água	28,7

A análise cromatográfica da fração alcatrão indicou uma variedade muito grande de substâncias químicas, entre elas metanol, ácido acético, furfural, fenol e compostos de pesos moleculares mais elevados, como óleo creosoto etc.

Os rendimentos e composições dos produtos de pirólise podem variar significativamente para uma mesma biomassa, pois dependem fortemente das condições de pirólise e das dimensões das partículas. Partículas aquecidas rapidamente tendem a gerar muito mais gás e alcatrão do que partículas aquecidas lentamente. Da mesma forma, partículas de pequenas dimensões tendem a gerar mais gás e alcatrão do que partículas grandes, quando submetidas às mesmas condições de aquecimento. O rendimento em carbono fixo, em ambas as situações, tende a cair.

Este comportamento está associado provavelmente à decomposição secundária de alcatrão dentro da própria matriz de carbono fixo. Havendo condições adequadas de temperatura e de tempo de permanência no interior da matriz sólida, o alcatrão pode se decompor em um resíduo carbonoso com composição muito próxima à do carbono fixo obtido no ensaio de pirólise, elevando o rendimento em carvão e gás. Desta forma é importante que as condições experimentais dos ensaios de pirólise sejam as mais próximas possíveis das existentes no gaseificador simulado. As dimensões das partículas de *Eucalyptus* empregadas no ensaio de pirólise ficaram próximas das dos cavacos utilizados no gaseificador e a temperatura final atingida no ensaio foi de 1073 K. A velocidade de aquecimento estabelecida também foi da mesma ordem da velocidade de aquecimento dos cavacos no interior do gaseificador experimental.

A composição dos produtos de pirólise considerada na simulação é igual à composição da mistura das frações de gás, água e alcatrão obtidas no ensaio experimental de pirólise, apresentada na Tabela 4.3

Embora o alcatrão seja uma mistura de componentes, adotou-se para ele um peso molecular médio de 180 kg/kmol, igual ao da glicose, para o cálculo da vazão e da fração molar na fase gasosa.

Tabela 4.3 Composição do produto de pirólise empregado na simulação, obtida a partir de ensaio experimental em retorta.

Componente Gasoso	% Massa	Componente Gasoso	% Massa
CO	11,64	CO ₂	14,25
H ₂	0,57	CH ₄	4,27
H ₂ O	40,13	C ₂ H ₆	0,63
A _{lc}	28,51	-	-

As análises imediata e elementar dos cavacos de Eucalyptus empregados nos ensaios de pirólise em retorta metálica são apresentadas nas Tabelas 4.4 e 4.5.

Tabela 4.4 Análise imediata do cavaco de Eucalyptus (% massa, b.s.).

Carbono Fixo	Matéria Volátil	Umidade	Cinzas
14,1	85,7	0,0	0,23

Tabela 4.5 Análise elementar do cavaco de Eucalyptus (% massa,b.s.).

C	H	O	N	S	Cz
47,10	5,70	46,22	0,40	0,06	0,52

Observe-se que o teor de carbono fixo na análise imediata ficou bem abaixo do obtido no ensaio de pirólise em retorta, de 28,6 %, o que pode ter sido

provocado pelo rápido aquecimento e pela moagem da amostra de madeira nos ensaios de análise imediata.

A análise elementar do carbono fixo obtido no ensaio de pirólise é apresentado na Tabela 4.6.

Tabela 4.6 Análise elementar do carbono fixo obtido no ensaio de pirólise.

C	H	O	N	S	Cz
93,0	1,0	3,2	1,4	0,08	1,32

A partir desta análise pode-se calcular os coeficientes molares a_i do carbono fixo, empregados na modelagem das reações heterogêneas de combustão e gaseificação. Os coeficientes obtidos foram os seguintes :

Tabela 4.7 Coeficientes molares calculados para o carbono fixo.

a_{14} (C)	a_{15} (H)	a_{16} (O)	a_{17} (N)	a_{18} (S)
1,0	0,129	0,025	0,013	0,0003

4.2.2. Cálculo das Taxas de Reação de Combustão e Gaseificação de Cavacos.

As taxas das reações heterogêneas para partículas com geometria plana, na forma de cavacos, podem ser determinadas a partir da equação de continuidade de componentes gasosos na fase sólida, eq. (3.10).

Para a reação heterogênea (R-3), onde o único reagente gasoso é o dióxido de carbono, a derivada do fluxo mássico deste gás ao longo da espessura da partícula, dividida pelo seu peso molecular, assume a forma :

$$\frac{dJ_i}{dy} = v_i R_j \quad (4.3)$$

onde : $i = 2$ (correspondente ao CO_2),

$$j = 3 \text{ e}$$

$$v_{2,3} = -1$$

Substituindo o fluxo de massa j_i na direção y , definido em (3.3), na equação (4.3), e dividindo pelo peso molecular do componente i , obtém-se :

$$\frac{d^2(D_{m,i}C_i)}{dy^2} = R_j \quad (4.4)$$

onde C_i é a concentração molar do componente i nos poros da fase sólida.

Na literatura as reações heterogêneas R_j normalmente são aproximadas por uma reação de primeira ordem, como a apresentada a seguir :

$$R_j = k_j(C_i - C_{i,eq}) \quad (4.5)$$

onde : $C_{i,eq}$ = concentração de equilíbrio do componente i na reação j e

k_j = constante de velocidade da reação j .

Quando a concentração do componente i se aproxima da concentração de equilíbrio, a velocidade da reação tende a zero.

Admitindo que a difusividade do componente i , no interior da partícula, é constante e substituindo a eq. (4.5) em (4.4), chega-se a :

$$D_{f,i} \frac{d^2 C_i}{dy^2} = k_j (C_i - C_{i,eq}) \quad (4.6)$$

Esta equação diferencial de segunda ordem em y pode ser resolvida a partir das condições de contorno :

- Simetria em relação ao plano xz em $y=0$:

$$\left. \frac{dC_i}{dy} \right|_{y=0} = 0 \quad (4.7)$$

- Balanço de massa na superfície da partícula :

$$J_i|_{y=y_s} = -D_{f,i} \left. \frac{dC_i}{dy} \right|_{y=y_s(-)} = -k_{TM,i} (C_{i,\infty} - C_{i,y_s}) \quad (4.8)$$

onde : $J_i|_{y=y_s}$ = fluxo molar do componente i na superfície da partícula,

C_{i,y_s} = concentração molar do componente i na superfície da partícula e

$C_{i,\infty}$ = concentração molar do componente i na fase gasosa.

A primeira condição de contorno resulta da simetria das partículas em relação ao plano xz e a segunda da equação de continuidade para o componente gasoso i , na interface partícula-gás. Ela estabelece que o fluxo do componente

gasoso i na superfície imediatamente inferior da interface sólido-gás, na fase sólida, é igual ao fluxo na superfície imediatamente superior, na fase gasosa.

Esta equação pode ser expressa em termos adimensionais a partir das relações:

$$\theta_i = \frac{(C_i - C_{i,eq})}{(C_{i,\infty} - C_{i,eq})} \quad (4.9)$$

onde : θ_i = concentração adimensional do componente i .

e

$$\chi = \frac{y}{y_s} \quad (4.10)$$

com : χ = espessura adimensional de partícula e

y_s = metade da espessura inicial de partícula.

Substituindo estes termos na equação (4.6) e rearranjando, obtém-se :

$$\frac{d^2\theta_i}{d\chi^2} = y_s^2 \frac{k_j}{D_{fn,i}} \theta_i \quad (4.11)$$

Esta equação pode ser reescrita em termos do coeficiente de Thiele, definido como:

$$N_{Th} = y_s \left(\frac{k_j}{D_{fn,i}} \right)^{0,5} \quad (4.12)$$

Este coeficiente relaciona a cinética da reação com a difusividade do componente i através do núcleo da partícula. Valores elevados deste coeficiente indicam que o controle da reação está no processo de difusão pelo núcleo. Valores baixos indicam que o controle está na cinética da reação.

Após a introdução deste termo na equação (4.11), ela se reduz a:

$$\frac{d^2\theta_i}{d\chi^2} = N_{Th}^{0,5}\theta_i \quad (4.13)$$

As condições de contorno para a resolução desta equação são :

- Simetria em relação ao plano xz em $y=0$:

$$\left. \frac{d\theta_i}{d\chi} \right|_{\chi=0} = 0 \quad (4.14)$$

- Balanço de massa na superfície do cavaco :

$$\left. \frac{d\theta_i}{d\chi} \right|_{\chi=a} = \frac{y_s}{D_{fn,i}} k_{TM,i} (1 - \theta_{i,s}) \quad (4.15)$$

onde $\theta_{i,s}$ é a concentração adimensional do componente i na superfície do cavaco.

A concentração adimensional do componente i ao longo da espessura do cavaco, θ_i , é dada por :

$$\theta_i = \frac{y_s k_{TM,i}}{D_{fn,i} N_{Th}} (1 - \theta_{i,s}) \frac{(\exp(N_{Th}\chi) + \exp(-N_{Th}\chi))}{(\exp(N_{Th}a) - \exp(-N_{Th}a))} \quad (4.16)$$

onde a é a fração não reagida da partícula inicial.

A concentração adimensional do componente i na superfície da partícula, $\theta_{i,s}$, pode ser calculada a partir desta última equação, fazendo $\chi = a$. Após rearranjo, obtém-se :

$$\theta_{i,s} = \frac{\psi}{1+\psi} \quad (4.17)$$

onde :

$$\psi = \frac{y_s k_{TM,i}}{D_{fn,i} N_{Th}} \cot gh(N_{Th} a)$$

A partir desta concentração e da equação (4.8), pode-se calcular o fluxo molar do componente gasoso i através da superfície da partícula :

$$J_i|_{y=y_s} = \frac{-(C_{i,\infty} - C_{i,eq})}{\frac{1}{k_{TM,i}} + \frac{y_s \cot gh(N_{Th} a)}{D_{fn,i} N_{Th}}} \quad (4.18)$$

Observe-se que quando a concentração do componente i , na fase gasosa, é maior que a concentração de equilíbrio no interior da partícula, o componente se difunde em sentido contrário ao do eixo y .

Este fluxo é igual à integral da reação heterogênea R_i em y , nas equações de cálculo das descargas (3.14) a (3.16).

4.2.3. A Constante de Velocidade das Reações Heterogêneas, k_j .

No cálculo do coeficiente de Thiele, equação (4.12), a constante de velocidade de reação k_j tem unidade s^{-1} . As constantes de velocidade das reações heterogêneas disponíveis na literatura, normalmente são apresentadas em outras unidades, e têm de ser previamente convertidas a s^{-1} para o cálculo do coeficiente de Thiele. As constantes de velocidade k_j serão representadas, neste trabalho, por uma relação do tipo de Arrhenius :

$$k_j = k_{0,j} \exp\left(-\frac{E_j}{RT_s}\right) \quad (4.19)$$

onde : $k_{0,j}$ = fator de frequência da reação j e

E_j = energia de ativação da reação j .

Os valores dos parâmetros disponíveis para a determinação das constantes de velocidade das reações heterogêneas são apresentados na Tabela 4.8.

Tabela 4.8 Parâmetros para a determinação das constantes de velocidade das reações heterogêneas.

Reação	$k_{0,j}$	Unidade	E_j/R (K)	Referências
R-1	17,67	$Pa^{-1}s^{-1}$	13597	SERGEANT e SMITH (1973)
R-2	$4,066 \cdot 10^{-3}$	$Pa^{-1}s^{-1}$	17625	GIBSON e EUKER (1975)
R-5	$4,125 \cdot 10^6$	s^{-1}	13555	THURNER e MANN (1981)

A constante de reação $k_{0,3}$ foi obtida de SMOOT E PRATT (1979) e é calculada através da relação :

$$k_{0,3} = \frac{k_{31} \exp\left(-\frac{E_{31}}{T_s}\right)}{1 + k_{32} \exp\left(-\frac{E_{32}}{T_s}\right) P_{CO} + k_{33} \exp\left(-\frac{E_{33}}{T_s}\right) P_{CO_2}} \quad (4. 20)$$

onde : $k_{31} = 1,24 \cdot 10^3 \text{ Pa}^{-1} \text{ s}^{-1}$ e $E_{31} = 29600 \text{ K}$,

$k_{32} = 1,24 \cdot 10^{-13} \text{ Pa}^{-1}$ e $E_{32} = -22900 \text{ K}$,

$k_{33} = 31,2 \text{ Pa}^{-1}$ e $E_{33} = 15100 \text{ K}$.

A constante de equilíbrio da reação (R-4) foi obtida de JOHNSON (1979) e calculada através da relação :

$$k_{0,4} = \frac{k_{41} \exp\left(-\frac{E_{41}}{T_s}\right)}{1 + k_{42} \exp\left(-\frac{E_{42}}{T_s}\right)} \quad (4. 21)$$

onde : $k_{41} = 2,354 \cdot 10^{-11} \text{ Pa}^{-1} \text{ s}^{-1}$ e $E_{41} = 13673 \text{ K}$,

$k_{42} = 4,752 \cdot 10^{-12} \text{ Pa}^{-1}$ e $E_{42} = -11096 \text{ K}$.

Na literatura consultada as taxas de consumo de resíduo carbonoso normalmente são representadas sob a forma :

$$\left. \frac{dM_c}{dt} \right|_j = -M_c k_j (P_i - P_{i,eq}) \quad (4. 22)$$

onde: k_j^* = constante de velocidade de reação j ,

M_c = massa de carbono no reator (kg) e

P_i = pressão parcial do reagente i na fase gasosa (Pa).

Observe-se que a unidade da constante de reação k_j^* não é s^{-1} . A sua conversão a s^{-1} não é trivial, e é apresentada a seguir.

Esta equação pode ser expressa em termos de concentrações molares, C_c , dividindo-se-a pelo volume do reator :

$$\frac{dC_c}{dt} = -C_c k_j^* (C_i - C_{i,eq}) RT_s \quad (4. 23)$$

ou

$$\frac{dC_c}{dt} = -k_j (C_i - C_{i,e}) \quad (4. 24)$$

com $k_j = k_{0,j}^* C_c RT_s$.

O termo k_j é a constante de velocidade da reação j expressa em s^{-1} .

A equação (4.24) estabelece uma relação entre a concentração molar de carbono e do reagente gasoso i no reator. Para torná-la função somente da concentração do reagente gasoso i , emprega-se os coeficientes estequiométricos das reações R-1 a R-4. Por exemplo, na reação R-1, para cada mol de carbono há o consumo de $v_{8,1}$ moles de oxigênio e o coeficiente estequiométrico é dado por :

$$v_{8,1} = (a + \frac{a_{15}}{4} - \frac{a_{16}}{2} + \frac{a_{17}}{2} + a_{18}) \quad (4.25)$$

Inserindo este coeficiente na equação (4.24), obtém-se a taxa de consumo de oxigênio no reator:

$$\frac{dC_8}{dt} = -\frac{k_1}{v_{8,1}}(C_8 - C_{8,e}) \quad (4.26)$$

ou seja, no cálculo do coeficiente de Thiele, a constante de velocidade a ser empregada é a calculada através da equação (4.24), dividida pelo coeficiente estequiométrico dado pela equação (4.25).

As concentrações de equilíbrio, $C_{i,eq}$, são calculadas a partir das constantes de equilíbrio de reação, $K_{eq,j}$, que são dadas por :

$$K_{eq,j} = K_{0,j} \exp\left(-\frac{\Delta \bar{H}_j}{RT}\right) \quad (4.27)$$

onde : $K_{0,j}$ = fator pré-exponencial da reação j e

$\Delta \bar{H}_j$ = entalpia de reação j.

As constantes de equilíbrio, em pressão próxima da atmosférica, podem ser calculadas, alternativamente, a partir da fugacidade ou da pressão parcial dos componentes gasosos, como indicado na Tabela 4.9.

Tabela 4.9 Parâmetros de cálculo das constantes de equilíbrio das reações heterogêneas.

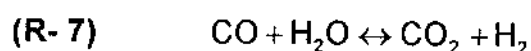
Reação	$K_{0,j}$		$\frac{\Delta \bar{H}_f}{R}$ (K)	Relação das pressões parciais	Referências
	Valor	Unidade			
R-2	$3,139 \cdot 10^{12}$	Pa	16344	$P_{CO} P_{H_2} P_{H_2O}^{-1}$	HOTTEL e HOWARD(1971)
R-3	$1,238 \cdot 10^{-14}$	Pa	20294	$P_{CO}^2 P_{CO_2}^{-1}$	PARENT e KATZ (1948)
R-4	$1,453 \cdot 10^{-11}$	Pa^{-1}	-11005	$P_{CH_4} P_{H_2}^{-2}$	HOTTEL e HOWARD (1971)

A concentração de equilíbrio da reação de combustão (R-1), segundo HASLAM e RUSSEL (1926), é praticamente nula para as temperaturas em que ela se desenvolve. Desta forma, na equação (4.16), a concentração de equilíbrio pode ser considerada igual a zero.

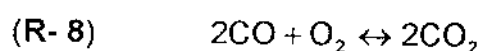
4.3. Reações Homogêneas.

As reações homogêneas consideradas no modelo são as seguintes :

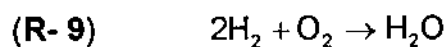
- Reação de gás d'água ou de "shift" (MOE, 1962) :



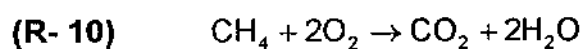
- Reação de combustão de CO (HOTTEL E HOWARD, 1971) :



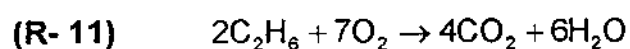
- Reação de combustão de hidrogênio :



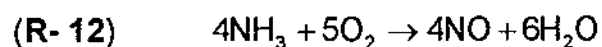
- Reação de combustão de metano :



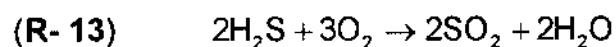
- Reação de combustão de etano :



- Reação de combustão de amônia :



- Reação de combustão de sulfeto de hidrogênio :



Observe-se que a maioria destas reações são de combustão de componentes gasosos, alguns deles presentes em pequena quantidade na fase gasosa. Estas reações têm menor importância na modelagem do gaseificador em consideração. A sua presença no modelo teve por objetivo ampliar o grau de generalidade do mesmo.

A reação (R-7), conhecida por reação de "shift" ou de gás d'água, é a responsável pela geração da maior parte de hidrogênio no gaseificador. A cinética desta reação foi adaptada do trabalho de MOE (1962) por SOUZA SANTOS (1985) para fornecer :

$$R_7 = (1 - \varepsilon_L)(w_{19}\rho_{mu}(1 - a) + \rho_{cz}(1 - a))k_5(P_{co}P_{H_2O} - \frac{P_{co_2}P_{H_2}}{K_{eq,7}}) \quad (4. 28)$$

onde : w_{19} = fração mássica de cinza na biomassa úmida,

ρ_{mu} = densidade da biomassa úmida,

ρ_{cz} = densidade da cinza livre e

$K_{eq,7}$ = constante de equilíbrio da R-7.

Observe-se que a cinética desta reação é catalisada pela cinza da biomassa e pode ser reversível, dependendo da concentração dos componentes na fase gasosa.

A cinética da reação (R-8) foi obtida de HOTTEL e HOWARD (1971), dada por :

$$R_8 = \delta_8 y_{CO} \quad (4. 29)$$

$$\text{onde : } \delta_8 = 17,5k_8\varepsilon_L C_g^{0,5} y_{H_2O}^{0,5} \frac{y_{O_2}}{(1 + 24,7y_{O_2})},$$

C_g = concentração molar da fase gasosa e

y_i = fração molar do componente i na fase gasosa.

Esta reação, altamente exotérmica, é a responsável pela elevação de temperatura da fase gasosa na região de combustão. Nesta região, a partir da reação de combustão (R-1) e dada a elevada temperatura da fase sólida, forma-se uma grande quantidade de CO na superfície das partículas. Este gás se difunde para a fase gasosa onde sua concentração vai se elevando até atingir a ignição. A partir deste ponto a concentração de CO cai rapidamente e a temperatura da fase gasosa se eleva bruscamente. A concentração de CO₂ na fase gasosa se eleva, voltando a cair na região de gaseificação.

As cinéticas das reações de combustão, (R-9) a (R-13), seguem mecanismos complexos e a determinação precisa das suas cinéticas demanda um tempo de computação significativo. Como estas reações desempenham papel secundário no gaseificador contracorrente em análise, uma vez que a geração de H₂, NH₃, H₂S, CH₄ e C₂H₆ costuma ser pequena na região de combustão, optou-se pela simplificação das reações de combustão destes gases. Adotou-se, para estas reações, a mesma cinética e o mesmo coeficiente δ_6 obtidos para a combustão de CO. Desta forma a cinética destas reações é calculada a partir da relação :

$$R_{j=9a13} = \delta_6 y_i \quad (4.30)$$

onde y_i é fração molar do reagente i de referência na reação j .

O fator de frequência e a energia de ativação empregados no cálculo das reações homogêneas são apresentados na Tabela 4.10.

Tabela 4.10 Parâmetros para cálculo das constantes das reações homogêneas.

Reação		$k_{0,j}$	Unidade	E_j/R	Referências
R-7	k_7	$2,91 \cdot 10^{-11}$	$\text{Pa}^{-2}\text{s}^{-1}$	4900	MOE (1962)
R-8	k_8	$5,97 \cdot 10^7$	$\text{kmol}^{-0,8}\text{m}^{2,4}\text{s}^{-1}$	8053	HOTTEL (1971)

Capítulo 5

5. RESOLUÇÃO DO SISTEMA DE EQUAÇÕES DO MODELO.

5.1. *Consolidação das Equações da Modelagem.*

Na modelagem apresentada a fase sólida do gaseificador contracorrente foi dividido em duas áreas. A primeira engloba as regiões de combustão e gaseificação e a segunda as regiões de pirólise, secagem e aquecimento. Esta metodologia levou à geração de dois sistemas de equações diferenciais.

Nas regiões de combustão e gaseificação, a partir da aplicação das equações fundamentais de conservação de massa e de energia nas duas fases: sólida e gasosa, obteve-se um sistema de equações diferenciais não lineares, denominado Sistema 1. Este sistema é composto de 21 equações e permite calcular as variações de temperatura e de composição das duas fases ao longo do leito, nas regiões consideradas.

As equações diferenciais que compõem o Sistema 1 são as seguintes :

- Seis equações de continuidade de espécies químicas componentes da fase sólida, numeradas de 14 a 19, conforme a equação (3.15) :

$$\frac{dF_i}{dz} = \frac{A_{Ts}}{y_s} \sum_j v_{ij} M_i \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy \quad (5.1)$$

- Treze equações de continuidade dos componentes gasosos numerados de 1 a 13, na fase gasosa, conforme a equação (3.59) :

$$\frac{dF_i}{dz} = A_{Tg} \sum_{j=Rhom} v_{ij} R_j M_i + \frac{A_{Ts}}{y_s} \sum_{j=Rhet} v_{ij} M_i \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy \quad (5.2)$$

- Uma equação de conservação da energia na fase sólida, equação (3.32) :

$$F_s c_{ps} \frac{dT_s}{dz} = A_{Ts} \left(\frac{d}{dz} (K_r + K) \frac{dT_s}{dz} \right) - \frac{A_{Ts}}{y_s} \left(\sum_i \sum_j v_{ij} \bar{H}_i \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy \right. \\ \left. + \sum_{i=gasoso} \sum_j v_{ij} H_i^0 \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy + h(T_s - T_g) \right) \quad (5.3)$$

- Uma equação de conservação da energia na fase gasosa, equação (3.68) :

$$F_g c_{pg} \frac{dT_g}{dz} = -A_{Tg} \sum_i (\bar{H}_i + \bar{H}_i^0) \sum_{j=Rhom} v_{ij} R_j + \frac{A_{Ts}}{y_s} h(T_s - T_g) + \\ + \pi D_L h_{pe} (T_{pe} - T_a) + \frac{A_{Ts}}{y_s} \sum_i \sum_{j=Rhet} v_{ij} \bar{H}_i \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy \quad (5.4)$$

Nas regiões de pirólise, secagem e aquecimento, obteve-se um segundo sistema, composto de 16 equações diferenciais ordinárias e uma equação diferencial parcial parabólica, denominado Sistema 2. Este sistema permite calcular a variação da temperatura e da composição da fase sólida ao longo da altura do gaseificador e da espessura de partícula, bem como a variação da temperatura e da composição da fase gasosa ao longo da altura do gaseificador. As equações que compõem o Sistema 2 são as seguintes :

- Uma equação de continuidade dos produtos gasosos da pirólise na direção y, no interior da fase sólida, equação (3.53) :

$$\frac{d(W_{gp})}{dy} = \sum_{i=1}^{13} v_{ij} R_{12} M_i \quad (5. 5)$$

- Uma equação de continuidade dos produtos sólidos na direção z, equação (3.44) :

$$\frac{d(W_s)}{dz} = \sum_{i=14}^{19} \sum_{j=12}^{13} v_{ij} R_j M_i \quad (5. 6)$$

- Treze equações de continuidade dos componentes gasosos da fase gasosa, conforme a equação (3.15) :

$$\frac{dF_l}{dz} = \frac{A_{Ts}}{y_s} \sum_{i=12}^{13} v_{ij} M_i \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy \quad (5. 7)$$

- Uma equação de conservação da energia na fase sólida, equação (3.52) :

$$W_s c_{ps} \frac{\partial T_s}{\partial z} = -W_{gp} c_{pg} \frac{\partial T_s}{\partial y} - W_{gv} c_{pv} \frac{\partial T_s}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial T_s}{\partial y} \right) - (H_{gp} + H_p - H_s) \frac{\partial W_{gp}}{\partial y} \quad (5.8)$$

- Uma equação de conservação de energia na fase gasosa, conforme equação (3.68):

$$F_g c_{pg} \frac{dT_g}{dz} = \frac{A_{Ts}}{y_s} \left[\sum_{i=1}^{13} \sum_{j=12}^{13} v_{ij} \bar{H}_i \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy + h(T_s - T_g) \right] + \pi D_L h_{pe} (T_{pe} - T_a) \quad (5.9)$$

5.2. Métodos Numéricos de Resolução dos Sistemas Apresentados.

O modelo de simulação do gaseificador desenvolvido é composto por dois sistemas de equações, resolvidos separadamente, como descrito a seguir.

5.2.1. Sistema 1 : Regiões de Combustão e Gaseificação.

O Sistema 1 é resolvido pelo método de integração de Gear, com passo variável, utilizado em rotina de resolução de sistema de equações diferenciais ordinárias existente no pacote matemático IMSL.

Na região de combustão e gaseificação o modelo é unidimensional, com o eixo z orientado no sentido da base do gaseificador para o topo. As condições de contorno da fase gasosa são conhecidas na base do leito, admitidas iguais às da

corrente resultante da mistura de ar e vapor. As da fase sólida não são conhecidas, e precisam ser determinadas através de um processo iterativo.

A hipótese do resíduo sólido apresentar condutividade zero na base do leito é conveniente, pois permite anular o valor da derivada primeira da temperatura da fase sólida na cota z igual a zero. Restam ser definidas as descargas dos componentes sólidos (ou taxa de consumo de carbono fixo) e a temperatura da fase sólida nesta cota.

A derivada primeira da temperatura da fase sólida fica sempre positiva a partir de uma determinada temperatura assumida para $z=0$, nas regiões de combustão e gaseificação. Esta condição, não observada nos ensaios experimentais, implicaria numa elevação contínua de temperatura ao longo do leito, inclusive na região de gaseificação. Esta temperatura é denominada temperatura limite. Temperaturas muito menores do que a temperatura limite provocam um resfriamento prematuro da fase sólida e taxas de consumo de carbono fixo reduzidas. A temperatura da fase sólida na base do leito que mais se aproxima dos dados experimentais é a própria temperatura limite, determinada por processo iterativo.

A temperatura limite varia com a taxa de consumo de carbono fixo estimada na base do leito, também determinada através de processo iterativo. Observe-se que a composição elementar do carbono fixo é considerada constante ao longo das regiões de combustão e gaseificação.

Nesta segunda iteração estima-se a fração de carbono fixo consumido na base do leito e calcula-se o seu valor ao fim da região de combustão e gaseificação. O processo iterativo se desenvolve até que o valor admitido da fração consumida se aproxime do valor calculado, dentro de uma margem de erro previamente estabelecida.

A resolução do Sistema 1 envolve, portanto, dois processos iterativos, um interno ao outro. Para cada taxa de conversão de carbono assumida, é feita uma convergência para a temperatura da fase sólida em $z=0$.

No método numérico empregado para a resolução do Sistema 1, a equação diferencial de segunda ordem (5.3) é substituída por duas equações diferenciais de primeira ordem, elevando o número de equações do Sistema 1 de 21 para 22 equações.

5.2.2. Sistema 2 : Regiões de Pirólise, Secagem e Aquecimento.

As equações diferenciais deste sistema são resolvidas pelo método explícito de Euler. Como as condições de contorno da fase sólida, no topo do gaseificador, estão definidas, optou-se por iniciar a resolução do sistema a partir do topo, indo até a seção onde se dá o fim da pirólise que, no presente modelo, coincide com a seção de fim de gaseificação. O sentido do eixo z adotado neste sistema é contrário ao adotado para a região de combustão e gaseificação, indo do topo para a base do leito.

A composição da fase gasosa no topo é determinada a partir da hipótese de que não há reações químicas na fase gasosa das regiões de pirólise, secagem e aquecimento. Para obter a composição no topo soma-se as descargas dos componentes gasosos calculados ao fim da região de combustão e gaseificação com as descargas dos produtos gasosos liberados na pirólise e secagem da biomassa, obtidas a partir de ensaios experimentais de pirólise de cavacos de madeira.

Para completar as condições de contorno necessárias para a resolução do Sistema 2, resta definir a temperatura da fase gasosa no topo do gaseificador. Esta temperatura é calculada a partir de um processo iterativo no qual, inicialmente, se estima o seu valor no topo do gaseificador e, a partir daí, se calcula a temperatura da fase gasosa ao fim da seção de pirólise. A iteração termina quando o valor da temperatura calculada se aproxima do valor da temperatura da fase gasosa no fim da região de gaseificação, obtida através da resolução do Sistema 1, dentro de uma margem de erro preestabelecida.

O Sistema 2, composto pelas equações (5.5) a (5.9), pode ser aproximado por um sistema de equações algébricas não lineares, como apresentado a seguir. O subscrito k, nas variáveis dependentes, representa os nós definidos ao longo da espessura do cavaco e o sobrescrito l, os nós ao longo da altura do cavaco.

$$W_{gp}|_{k+1}^l = W_{gp}|_k^l + \Delta y \sum_{i=1}^{13} v_{ij} R_{12}|_k^l M_i \quad (5.10)$$

$$W_s|_k^{l+1} = W_s|_k^l + \Delta z \sum_{i=1}^{13} v_{ij} R_{13}|_k^l M_i \quad (5.11)$$

$$F_i|_k^{l+1} = F_i|_k^l + \Delta z \frac{A_{Ts}}{y_s} \sum_{j=12}^{13} v_{ij} M_i \int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy \quad (5.12)$$

$$T_s|_k^{l+1} = A T_s|_{k+1}^l + B T_s|_k^l + C T_s|_{k-1}^l - D \quad (5.13)$$

$$T_g|_k^{l+1} = T_g|_k^l +$$

$$\Delta z \left\{ \frac{A_{Ts}}{y_s} \left[\sum_{i=1}^{13} \sum_{j=12}^{13} v_{ij} \bar{H}_i \left(\int_{y=0}^{y=y_s} R_j dy \right) \right] + h^l (T_s|_k^l - T_g|_k^l) + \pi D_L h_{pe}|^l (T_{pe}|^l - T_a) \right\} / (F_g|_k^l c_{pg}|^l) \quad (5.14)$$

$$\text{onde : } A = \left(-\frac{W_{gp}|_k c_{pg}}{\Delta y} - \frac{W_{gv}|_k c_{pv}}{\Delta y} + \frac{K|_k}{\Delta y^2} \right) / \left(\frac{W_s|_k c_{ps}|_k}{\Delta z} \right)$$

$$B = \left[1 + \left(\frac{W_{gp}|_k c_{pg}}{\Delta y} + \frac{W_{gv}|_k c_{pv}}{\Delta y} - \frac{(K|_k + K|_{k-1})}{\Delta y^2} \right) / \left(\frac{W_s|_k c_{ps}|_k}{\Delta z} \right) \right]$$

$$C = \left[\left(\frac{K|_{k-1}}{\Delta y^2} \right) / \left(\frac{W_s|_k c_{ps}|_k}{\Delta z} \right) \right]$$

$$D = \left[(H_{gp} + H_p - H_s) / \left(\frac{W_s|_k c_{ps}|_k}{\Delta z} \right) \right] R_{12}|_k$$

As temperaturas dos nós vizinhos ao centro e à superfície da partícula são calculadas a partir das condições :

- No centro da partícula, a partir da hipótese de simetria :

$$T_s|_{-1}^I = T_s|_{+1}^I$$

- Na superfície externa da partícula, a partir de uma temperatura hipotética $T_s|_{k+1}^I$ no nó $k+1$ na fase sólida, admitida igual a :

$$T_s|_{k+1}^I = T_s|_k^I + \Delta y \frac{h|_k}{K|_k} (T_g|_k^I - T_s|_{k+1}^I)$$

A influência do número de passos de integração nos resultados é abordada no Capítulo 6.5.

5.3. Diagrama de Blocos do Programa de Simulação.

O fluxograma do programa de simulação do gaseificador contracorrente é apresentado na Fig.5.1.

Inicialmente os dados de entrada são processados, gerando outros dados utilizados na simulação, como as porosidades do leito e da partícula, a temperatura da mistura de ar com o vapor introduzido na base do gaseificador, a molaridade dos componentes do carbono fixo etc.

A taxa de conversão ou consumo de carbono fixo na base do gaseificador é estimada, dando início a um processo iterativo nas regiões de combustão e gaseificação. A temperatura da fase sólida na cota $z=0$ também é estimada, dando início a um segundo processo reiterativo, interno ao anterior.

Uma vez determinada a temperatura da fase sólida na cota $z=0$ resolve-se o sistema de equações diferenciais, Sistema 1, até que a temperatura da fase sólida atinja 1073 K, temperatura abaixo da qual as taxas das reações de gaseificação são praticamente nulas. A taxa de consumo de carbono fixo é verificada neste ponto e comparada com a taxa de consumo estimada anteriormente. A reiteração continua até que a diferença caia abaixo de um valor predeterminado.

A partir da resolução do Sistema 1, define-se as condições de contorno da interface localizada entre as regiões de gaseificação e pirólise, bem como a altura

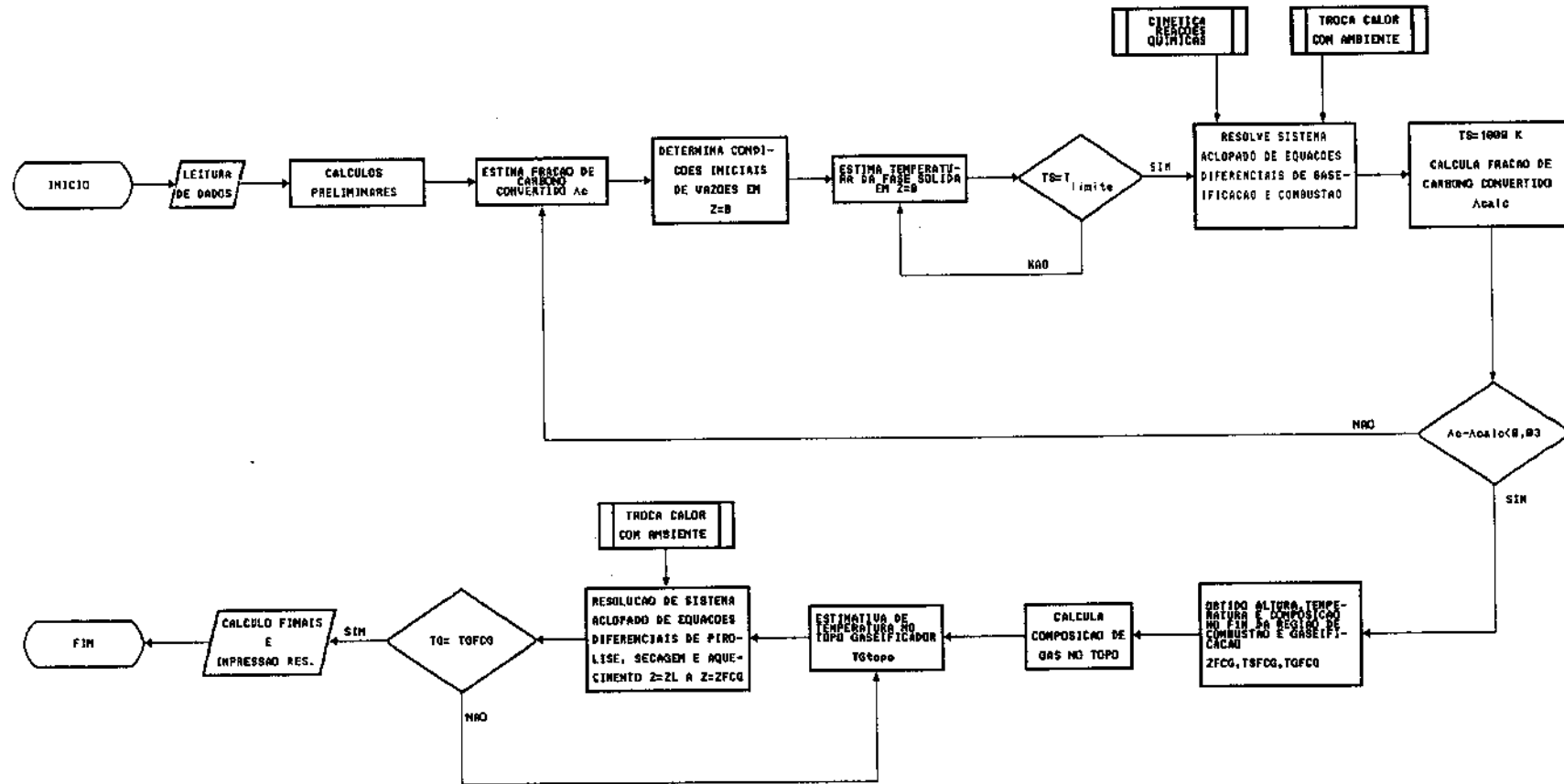


Fig. 5.1 Diagrama de blocos do programa de simulação de gaseificador de leito movente contracorrente.

do leito ocupada pelas regiões de combustão e gaseificação ($z=ZFCG$) e as temperaturas e composições das fases sólida e gasosa.

No topo do leito ($z=ZL$) as condições de contorno da fase sólida estão definidas bem como a composição da fase gasosa, como explicado anteriormente.

Estima-se a temperatura da fase gasosa, TG , no topo do leito ($z=ZL$), e calcula-se a temperatura da fase gasosa na cota correspondente à cota de término da gaseificação ($z=ZFCG$), através da resolução do Sistema 2. O processo reiterativo termina quando a diferença entre o valor da temperatura da fase gasosa calculado pelo Sistema 2 e o valor da temperatura calculado pelo Sistema 1 fica abaixo da margem de erro estabelecida.

O método de cálculo adotado garante a continuidade da temperatura da fase gasosa ao longo da altura do leito, mas não a da fase sólida. Com a resolução do Sistema 2 obtém-se, além da temperatura da fase gasosa na interface entre as regiões de gaseificação e pirólise, a temperatura da fase sólida. Esta temperatura, no entanto, também é obtida através da resolução do Sistema 1. Estas duas temperaturas, em todos os casos estudados, ficaram muito próximas, o que pode ser observado nas curvas de temperatura dos testes de sensibilidade, apresentadas mais adiante.

Após a convergência da temperatura da fase gasosa o programa calcula os parâmetros finais, como os rendimentos a frio e a quente, a composição dos gases seco e úmido, perdas de calor pelas paredes etc.

Capítulo 6

6. APRESENTAÇÃO E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS.

O modelo de pirólise proposto foi avaliado a partir dos dados experimentais obtidos em ensaios de gaseificação de cavacos de Eucalyptus realizados nas dependências do Agrupamento de Engenharia Térmica do Instituto de Pesquisas Tecnológicas S. A. do Estado de São Paulo, no ano de 1984. Foto do equipamento ensaiado é apresentada na Fig.6.1.

6.1. *Descrição do Dispositivo Experimental.*

O gaseificador ensaiado é do tipo contracorrente, com potência nominal de 500 kW de gás produzido.

Desenho esquemático do gaseificador com suas dimensões básicas foi apresentado na Fig. 3.1. Ele é constituído por um corpo cilíndrico de 0,5 m de diâmetro interno por 3,0 m de altura, revestido com tijolo refratário de 0,15 m de espessura.

O equipamento dispõe de diversos pontos para tomada de temperatura, pressão e amostras de gás, distribuídos ao longo da altura do leito. As temperaturas foram medidas com termopares de Cromel-Alumel. Para a

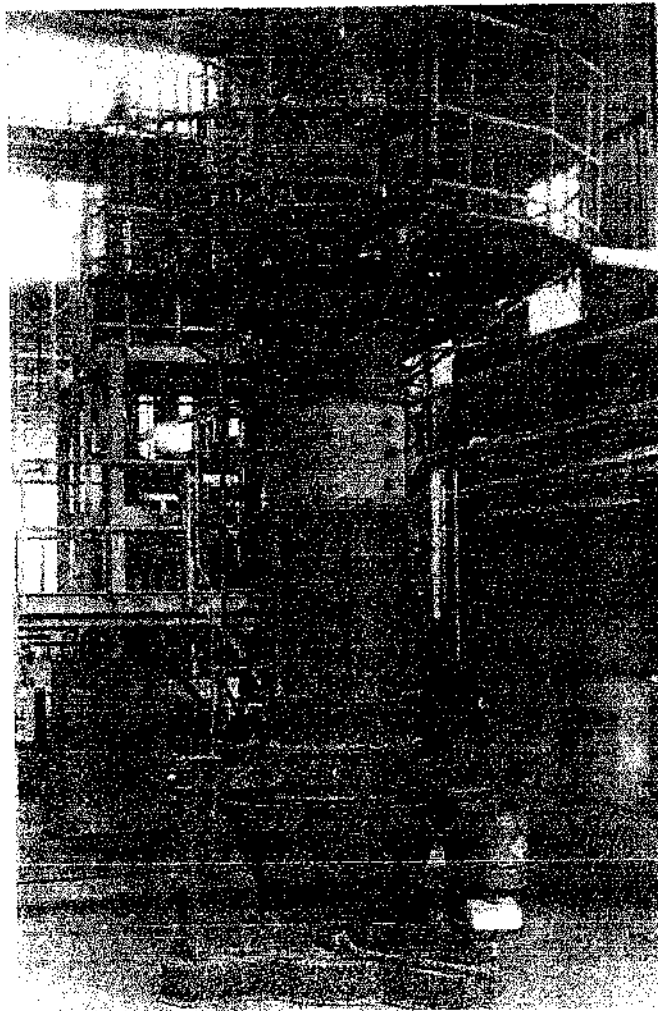


Fig. 6.1 Foto do gaseificador ensaiado.

amostragem de gases ao longo do leito foram empregadas sondas específicas; as pressões foram medidas com manômetros de coluna de água.

As medidas de vazão do vapor de gaseificação foram feitas com orifícios bloqueados e as de ar com placas de orifício.

Amostras do material alimentado foram recolhidas periodicamente ao longo do ensaio para determinação de sua composição, poder calorífico, análise granulométrica e umidade.

A determinação da composição de gases foi feita em analisadores contínuos, operando segundo princípios de absorção de radiação infravermelha (CO_2 , CO e CH_4), de variação de condutividade térmica (H_2) e de atração magnética (O_2).

6.2. Condições de Operação.

A duração total do ensaio experimental foi de 50 horas contínuas. Os dados apresentados, no entanto, correspondem a um período de 4,5 horas durante o qual as condições operacionais do gaseificador se aproximaram do regime permanente.

A alimentação de cavacos de madeira foi feita por bateladas, de 5,0 kg cada uma. As análises imediata e elementar do material alimentado ao gaseificador são apresentadas na Tabela 6.1.

Tabela 6.1 Análise imediata do material alimentado.

	Fração Mássica (% b.s.)	Fração Mássica (% b.u.)
Carbono Fixo	15,2	11,8
Voláteis	84,3	65,3
Cinzas	0,5	0,4
Umidade	--	22,5

Tabela 6.2 Análise elementar do material alimentado.

	Fração Mássica (% b.s.)
Carbono	43,9
Hidrogênio	5,2
Oxigênio	50,3
Nitrogênio	--
Enxofre	0,1
Cinzas	0,5

As densidades do material sólido alimentado ao gaseificador são apresentadas na Tabela 6.3.

Tabela 6.3 Densidade do cavaco de madeira empregado no ensaio de gaseificação.

DENSIDADE	kg/m ³	DESVIO PADRÃO
Global (empilhamento)	210	3,6
Aparente da partícula	580	12,0
Real	1500	--

O valor médio dos parâmetros operacionais registrados durante o ensaio de gaseificação são apresentados na Tabela 6.4.

Tabela 6.4 Valor médio dos parâmetros operacionais do ensaio experimental.

Descarga de material (kg/s)	$1,9760 \times 10^{-2}$
Descarga de ar (kg/s)	$1,2224 \times 10^{-1}$
Descarga de vapor (kg/s)	$2,3990 \times 10^{-3}$
Temperatura do ar (K)	346,8
Temperatura do vapor (K)	391,8
Altura do leito de sólido(m)	2,09
Diâmetro equivalente médio de partícula (m)	0,015
Pressão relativa na base do leito (Pa)	526,1
Pressão relativa no topo do leito (Pa)	348,4

6.3. Apresentação e Avaliação dos Resultados Obtidos.

Os resultados obtidos são apresentados e avaliados, compreendendo basicamente :

- Perfis de temperatura;
- Descargas e concentrações;

- Taxas de reação e
- Perdas de calor pelas paredes.

Outros resultados, que não puderam ser comparados por falta de dados experimentais, incluíram :

- Perfis de temperatura das fases sólida e gasosa;
- Perfil de temperatura na região de combustão;
- Perfis de temperatura do interior dos cavacos nas regiões de pirólise, secagem e aquecimento;
- Teor de alcatrão e umidade nos gases gerados e
- Teor de carbono fixo no material retirado pela base do gaseificador.

Analisou-se também o efeito da umidade, da espessura do cavaco, da entalpia de reação de pirólise e da condutividade do carbono fixo no desempenho do gaseificador.

6.3.1. Perfis de Temperatura.

As médias das temperaturas experimentais registradas ao longo do leito são apresentadas na Tabela 6.5.

Tabela 6.5 Perfil de temperatura registrado ao longo do leito no ensaio experimental.

COTA Z (m)	TEMPERATURA (K)	DESVIO PADRÃO
0,00	733,0	0,0
0,26	1534,8	12,5
0,40	1538,9	9,1
0,58	1501,8	14,9
0,80	1467,7	20,0
1,25	968,0	29,2
1,43	846,4	54,7
1,94	548,4	61,2
2,24	355,1	6,7

Observe-se na Tabela 6.5 que os desvios padrões das temperaturas medidas entre as cotas 0,80 e 1,94 m são muito elevados. Uma explicação possível é a de que, neste trecho, tenham ocorrido pirólise, secagem e aquecimento que, como foi discutido anteriormente, podem se sobrepor entre si. Além disto também foi freqüente a ocorrência de engaiolamento do leito nesta região, o que provocava variações bruscas de temperatura por ocasião do seu rompimento.

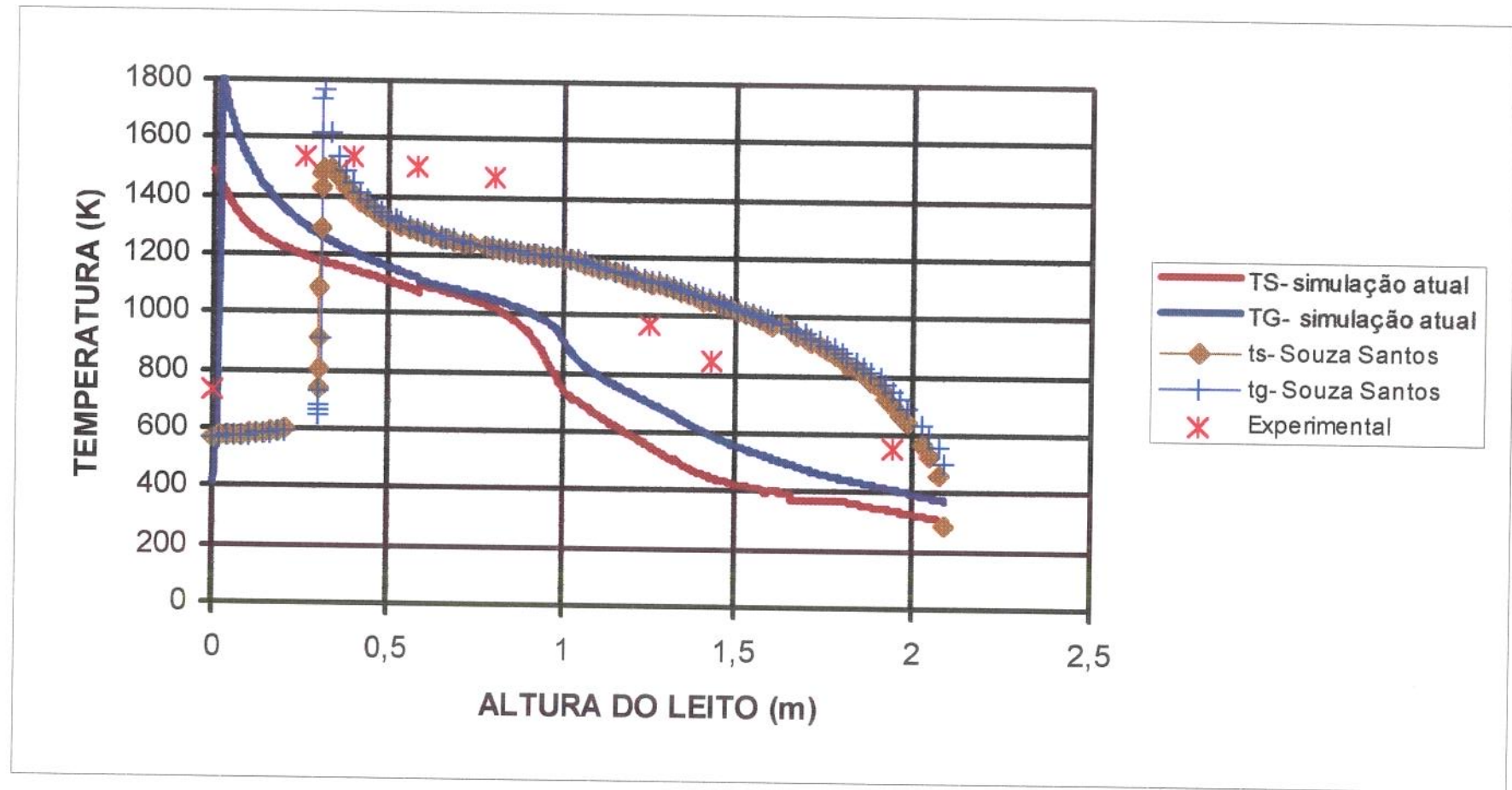


Fig. 6.2 Perfis de temperatura obtidos ao longo do leito do gaseificador. Resultados experimental e de simulação.

As temperaturas experimentais estão indicadas na Fig.6.2. Nesta figura também são representadas as curvas de temperatura da fase gasosa e da superfície da fase sólida obtidas nesta simulação, e as obtidas por SOUZA SANTOS (1985). Observe-se que os pontos experimentais representam uma temperatura média entre as temperaturas das fases gasosa e sólida, uma vez que o aparato experimental empregado não permitia obter as temperaturas das fases separadamente.

A curva identificada por TG representa a temperatura da fase gasosa e a curva identificada por TS a temperatura da superfície externa das partículas sólidas ao longo do leito, ambas obtidas através da simulação.

Os pontos marcados com x são os valores médios obtidos experimentalmente e as curvas identificadas por tg e ts são as curvas de temperatura obtidas por SOUZA SANTOS para as fases gasosa e sólida.

O perfil de temperatura da fase gasosa simulada, TG, apresenta um pico localizado na região imediatamente acima da base do gaseificador, o que pode ser observado com maior detalhe na Fig. 6.3.

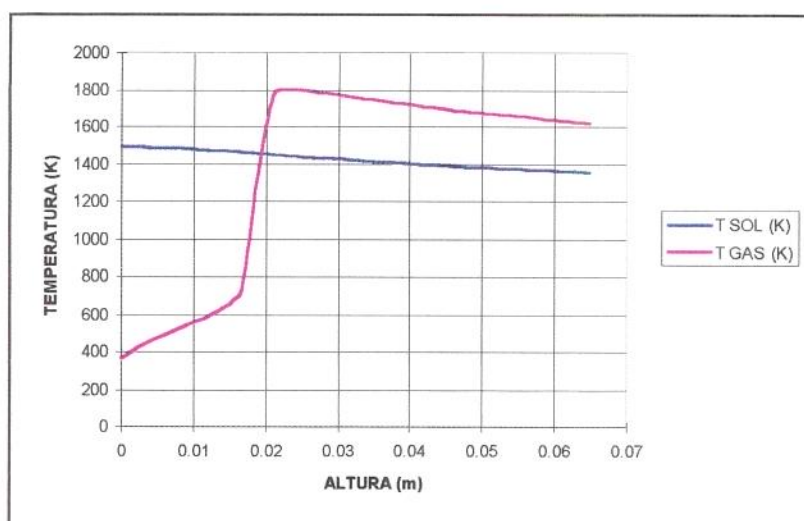


Fig. 6.3 Perfis de temperatura das fases sólida e gasosa na região localizada imediatamente acima da base do leito. Resultado de simulação.

A elevação acentuada da temperatura da fase gasosa observada é causada principalmente pela combustão de CO e H₂, produzidos na combustão e gaseificação da fase sólida na base do leito, entre as cotas 0,0 e 0,015 m.

O pico de temperatura obtido na simulação não pode ser confirmado experimentalmente : entre a cota 0 e a cota 0,26 m (cota do primeiro termopar imediatamente acima do termopar instalado na base do leito) pode ter ocorrido um pico de temperatura não registrado pela instrumentação disponível no gaseificador.

Após o pico de temperatura máxima, cuja localização coincide com a do fim da região de combustão ($z \approx 0,02$ m), há uma queda acentuada da temperatura simulada das fases gasosa e sólida. Esta queda é causada principalmente pelas reações de gaseificação heterogêneas, que são endotérmicas. Na curva experimental não se observa esta queda, obtendo-se um patamar praticamente constante em torno de 1500 K, ao longo de um trecho relativamente longo do gaseificador.

A diferença entre os perfis de temperatura experimental e simulado pode estar relacionada com o tratamento isotérmico dado à fase sólida na modelagem da região de gaseificação. Nesta região as reações heterogêneas endotérmicas podem criar um gradiente térmico significativo entre a superfície externa e o centro das partículas o que, por sua vez, pode levar a uma redução na taxa das reações de gaseificação endotérmicas que acontecem dentro das partículas. Com isto a temperatura da superfície das partículas se elevaria, reduzindo a transferência de calor entre as fases sólida e gasosa, mantendo a temperatura da fase gasosa em patamares mais elevados, aproximando-a da curva experimental. O tratamento não isotérmico da fase sólida na região de gaseificação é proposto como um tópico de desenvolvimento futuro do modelo em análise.

O trecho de queda acentuada de temperatura observado nos pontos experimentais, imediatamente após o patamar horizontal, corresponde às regiões de pirólise, secagem e aquecimento de carga. Nas curvas obtidas por esta simulação observa-se um comportamento semelhante neste trecho do gaseificador, porém em níveis de temperatura inferiores aos obtidos experimentalmente. Os perfis de temperatura obtidos por Souza Santos não apresentam esta queda abrupta.

Nas regiões de pirólise, secagem e aquecimento do modelo a partícula sólida não é considerada isotérmica. Os perfis das temperaturas de 6 pontos, distribuídos uniformemente ao longo da espessura de um cavaco contínuo, na direção y, são apresentados na Fig. 6.4

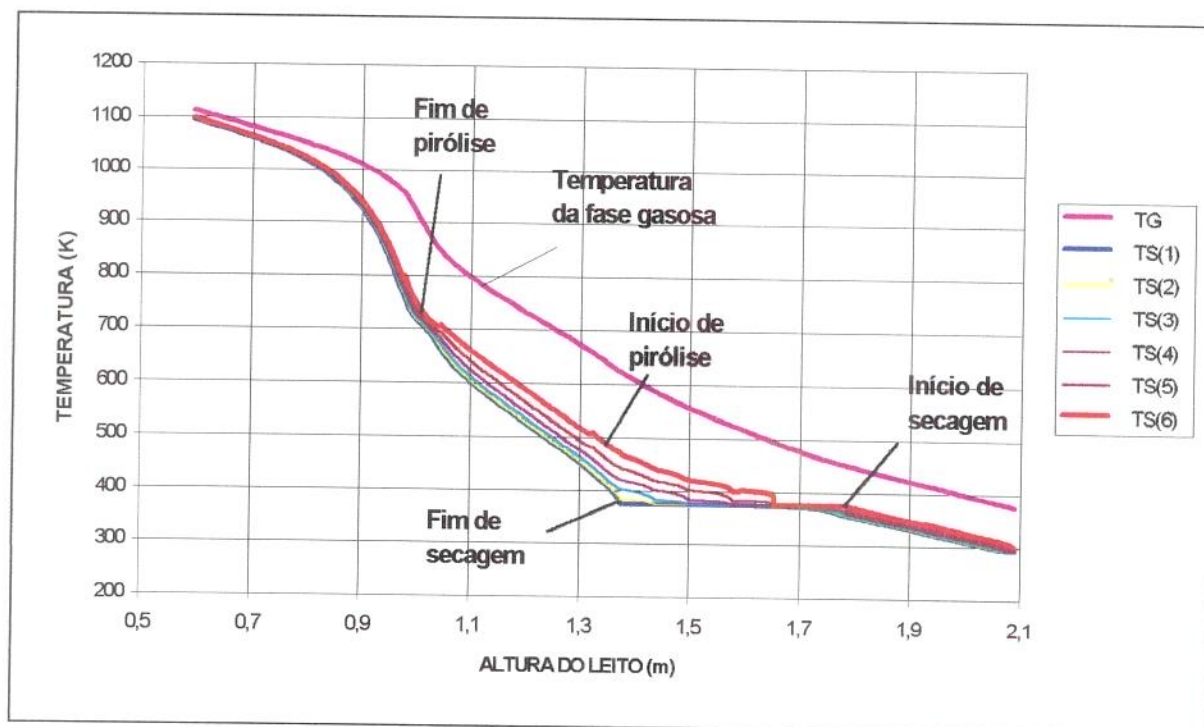


Fig. 6.4 Perfis de temperatura no interior dos cavacos, nas regiões de pirólise, secagem e aquecimento. Resultado de simulação.

A curva TS(1) corresponde à temperatura do centro do cavaco e a última, TS(6), à da superfície externa.

Tabela 6.6 Posicionamento dos nós internos aos cavacos.

Nó	Distância em relação ao eixo de simetria do cavaco, $y=0$ (m)
TS(1)	0,000
TS(2)	0,015
TS(3)	0,030
TS(4)	0,045
TS(5)	0,060
TS(6)	0,075

Note-se os gradientes de temperatura obtidos no interior da partícula através da simulação. O gradiente é máximo ao fim da região de secagem, com a variação de cerca de 100 K em apenas 0,075 m de partícula. Neste mesmo ponto o gradiente de temperatura entre o centro de partícula e a fase gasosa atinge cerca de 250 K.

Apesar da pirólise da camada mais externa da partícula ter início logo após o fim da secagem do núcleo, a cinética de reação de pirólise adotada somente assume valores consideráveis a partir de 673 K, o que pode ser observado através das inflexões nos perfis de temperatura dos nós internos, em cotas próximas a 1,0 m. Entre a cota de fim de secagem, 1,35 m, e a cota de 1,0 m, praticamente só ocorre aquecimento da biomassa seca.

6.3.2. Descargas e Concentrações dos Componentes.

As composições médias dos gases amostrados, na base seca, e os desvios padrões correspondentes, obtidos experimentalmente ao longo da altura do leito, são apresentados na Tabela 6.7. O gás produto corresponde ao gás coletado no topo do gaseificador, a cerca de 1 m acima do topo do leito de cavacos.

Tabela 6.7 Composição da fase gasosa ao longo do leito. Resultado experimental.

COTA Z (m)	COMPONENTE (% vol. b.s)							
	CO	σ_{CO}	CO ₂	σ_{CO_2}	CH ₄	σ_{CH_4}	H ₂	σ_{H_2}
0,88	27,60	2,09	6,33	1,15	--	--	22,23	0,31
1,11	28,70	0,31	6,00	0,00	0,12	0,10	23,20	0,35
1,43	27,30	0,55	6,33	0,58	0,48	0,10	23,80	0,17
1,62	26,17	0,90	7,00	0,00	1,57	0,89	24,20	0,19
1,80	25,13	2,01	8,33	1,53	1,21	0,38	22,50	0,90
2,09	26,13	0,12	8,67	0,58	1,33	0,18	22,60	0,17
Gás Produto	26,20	0,26	10,00	0,00	1,88	0,19	22,20	0,30

A representação gráfica destes teores é feita na Fig. 6.5. A curva de nitrogênio apresentada foi obtida por diferença, a partir dos dados da Tabela 6.7. Abaixo da cota 0,8 m não foram feitas amostragem de gases.

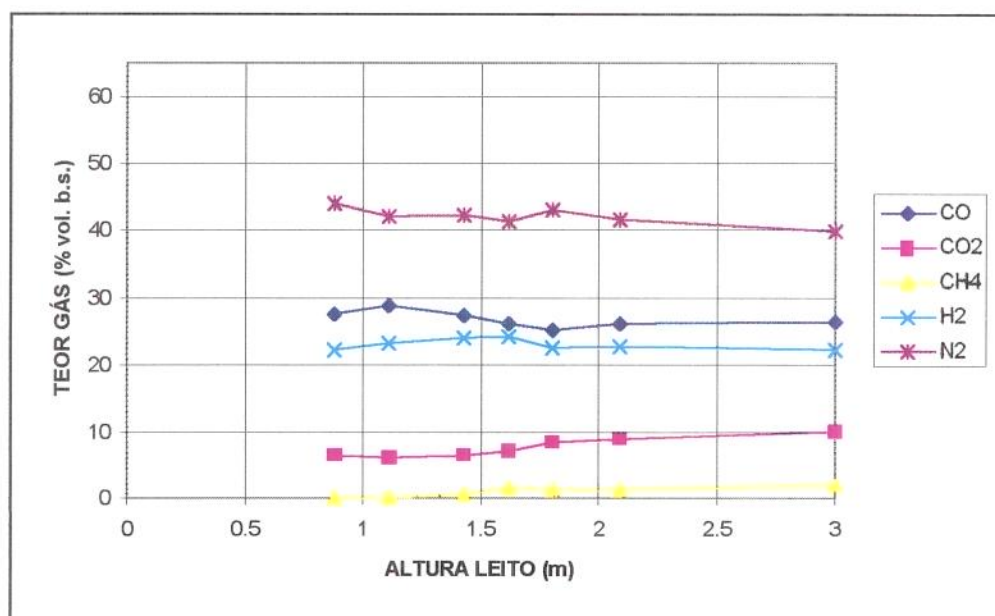


Fig. 6.5 Composição da fase gasosa ao longo da altura do gaseificador. Resultado experimental.

A simulação do gaseificador também permite obter as composições e as descargas das fases sólida e gasosa ao longo da altura. Na Fig.6.6 são apresentadas as curvas de concentração da fase gasosa simuladas, obtidas para as mesmas condições operacionais do ensaio experimental. Estas concentrações estão referidas a gás limpo, isto é, seco e sem presença de alcatrão.

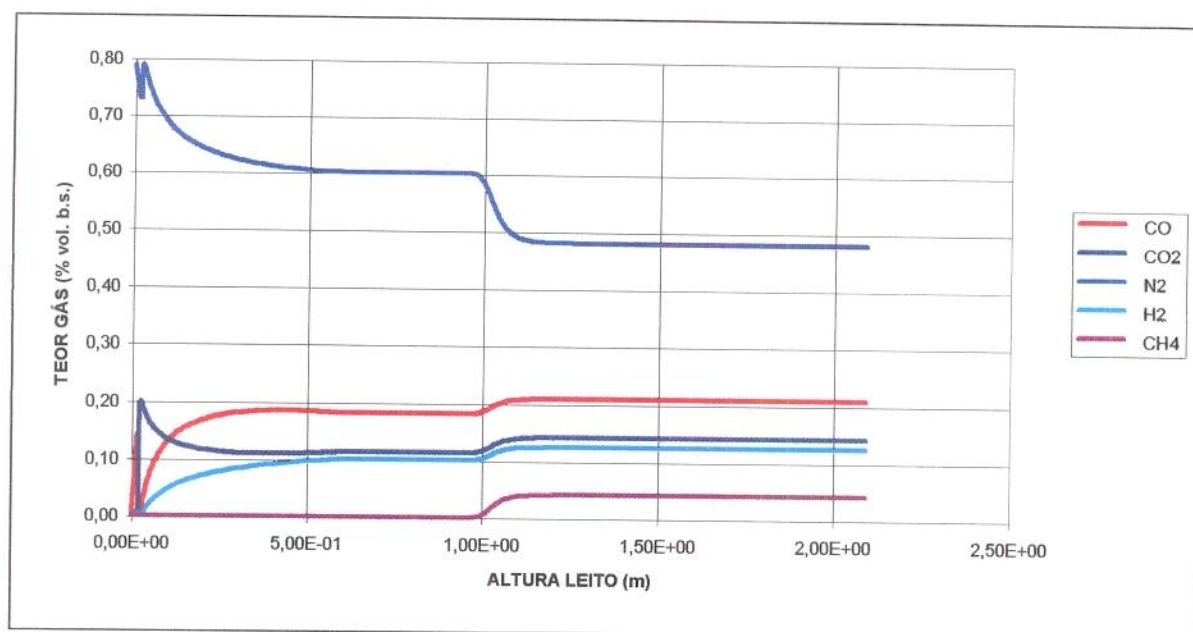


Fig. 6.6 Composição da fase gasosa ao longo da altura do leito (base seca, livre de alcatrão). Resultado de simulação.

Na curva de nitrogênio observa-se duas quedas acentuadas de concentração. A primeira acontece nas regiões de combustão e gaseificação, devido a formação de gases, principalmente CO e H₂, gerados a partir do consumo de O₂, CO₂ e H₂O. A segunda ocorre na região de pirólise, onde há uma liberação intensa de gases incondensáveis, provenientes da decomposição da matéria volátil.

Na curva experimental de concentração de nitrogênio, apresentada na Fig. 6.5, não se observa nenhuma queda acentuada de concentração o que faz supor que o primeiro ponto de amostragem experimental, na cota 0,88 m, estava localizado acima da zona de pirólise do gaseificador.

A tênue queda observada nas cotas superiores pode ser atribuída à decomposição de alcatrão presente na fase gasosa. Esta queda, observada em cota próxima a 0,88 m, também pode ser uma indicação de que a região de pirólise esteve próxima a esta cota. A zona de pirólise, na simulação, se situou em torno da

cota 1,0 m, próxima das cotas experimentais em que se observa uma queda acentuada de temperatura. A região de pirólise corresponde ao segundo trecho de queda observada na curva de teor de nitrogênio da fase gasosa, na região intermediária da Fig. 6.6.

A combustão de CO na base do gaseificador, que leva à ocorrência de um pico de temperatura na fase gasosa, também pode ser observado na Fig. 6.7. Esta figura é uma ampliação do trecho inicial da Fig. 6.6, à qual foi acrescentada a curva de concentração de oxigênio.

Observe-se que a concentração de CO, na fase gasosa, se eleva no trecho inicial do leito devido às reações de combustão e gaseificação da fase sólida. Quando a temperatura da fase gasosa atinge a temperatura de ignição, o CO e o H₂ produzidos são consumidos rapidamente e a temperatura da fase gasosa se eleva bruscamente.

Note-se ainda o consumo extremamente rápido do oxigênio, que

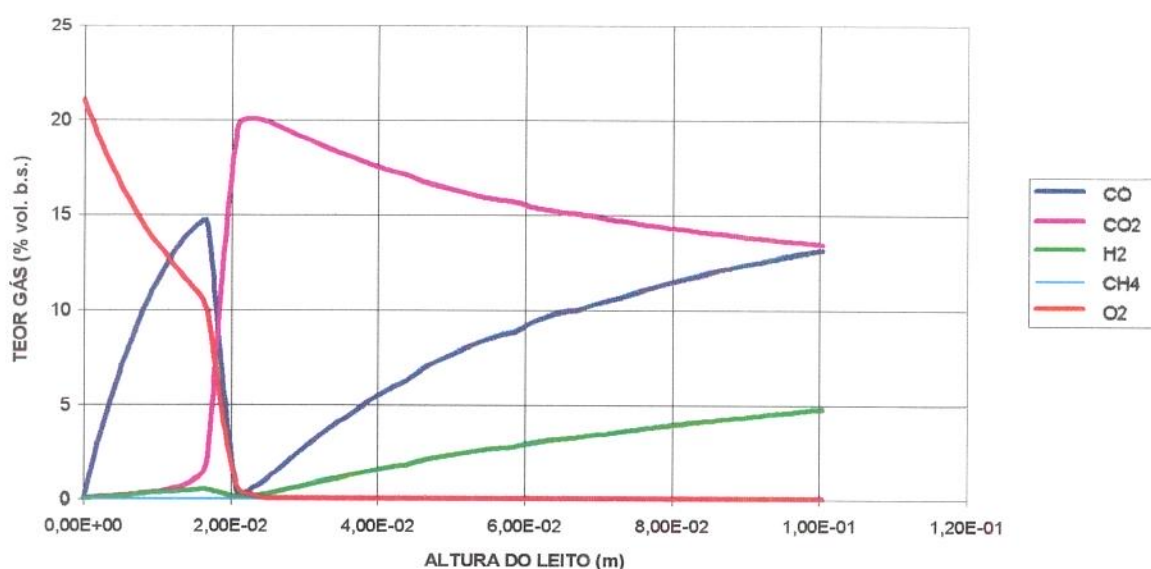


Fig. 6.7 Concentração de componentes na fase gasosa em região próxima à base do leito. Resultado de simulação.

praticamente deixa de existir a partir da cota 0,02 m. Esta cota pode ser considerada a cota de separação entre as regiões de gaseificação e combustão, embora reações de gaseificação também ocorram em cotas inferiores.

Resultados experimentais e simulados da composição da fase gasosa no topo do leito, livre de alcatrão e umidade, são apresentados na Tabela 6.8.

Tabela 6.8 Composição da fase gasosa no topo do leito, base seca.

Resultados experimental e simulado.

COMPONENTE	CONCENTRAÇÃO (% vol. gás limpo)	
	Simulação	Experimental
CO	20,90	26,1
CO ₂	14,08	8,7
CH ₄	4,14	1,3
H ₂	12,39	22,6
N ₂	47,91	41,3
C ₂ H ₆	0,32	(1)
H ₂ S	0,01	(1)
O ₂	0,00	(1)
NH ₃	0,00	(1)
NO	0,15	(1)
SO ₂	0,01	(1)

(1) Teores não determinados experimentalmente.

Os teores simulados de CO e H₂ ficaram abaixo dos teores experimentais enquanto os teores de CO₂ e CH₄ ficaram acima.

O teor total de gases combustíveis simulado ficou abaixo do experimental, como evidenciado pelo alto teor de nitrogênio obtido na simulação. Este fato pode ser consequência da decomposição do alcatrão na fase gasosa ocorrida durante o ensaio experimental. O modelo adotado neste trabalho pressupõe que o alcatrão não sofre decomposição na fase gasosa. ANTAL (1982), REED (1983), SERIO, PETERS e HOWARD (1987) verificaram que a decomposição de alcatrões de biomassa e de carvões minerais é muito intensa e rápida em temperaturas acima de 873 K. A temperatura da fase gasosa na região de pirólise, na simulação, ficou, em geral, acima de 873 K, condição suficiente para a ocorrência de uma decomposição intensa de alcatrão. A incorporação ao modelo de uma cinética e estequiometria de decomposição de alcatrão, no interior da partícula e na fase gasosa, constitui um tema para pesquisa posterior.

A diferença existente entre os teores de metano calculados e medidos pode, por sua vez, ser atribuído, em grande parte, à baixa sensibilidade do analisador empregado, cujo menor grau de resolução, de $\pm 1,0\%$, era da mesma ordem das concentrações lidas. Isto pode ser constatado examinando o desvio padrão apresentado na Tabela 6.7.

Os teores de vapor d'água e de alcatrão no topo do leito não foram medidos experimentalmente. Os resultados correspondentes obtidos na simulação, bem como os teores em base úmida dos demais componentes, estão na Tabela 6.9.

Tabela 6.9 Composição da fase gasosa no topo do leito, base úmida.**Resultado de simulação.**

COMPONENTE	CONCENTRAÇÃO (% vol. b. u.)	COMPONENTE	CONCENTRAÇÃO (% vol. b. u.)
CO	11,33	O ₂	0,00
CO ₂	7,63	NH ₃	0,05
CH ₄	2,25	NO	0,08
H ₂	6,72	SO ₂	0,01
N ₂	25,98	H ₂ O	44,43
C ₂ H ₆	0,18	ALCATRÃO	1,34
H ₂ S	0,00	-	-

Na tabela apresentada assume-se que todos os componentes estão na fase gasosa. O teor de alcatrão da Tabela 6.9, desta forma, é apenas um valor indicativo da concentração máxima de alcatrão possível de ser obtida na fase gasosa. No ensaio experimental, uma fração considerável de alcatrão se encontrava na fase líquida, no topo do leito, dispersa na forma de um aerossol.

Observe-se o teor volumétrico de vapor d'água obtido, de 44,43 %. Ar atmosférico com esta umidade tem uma temperatura de saturação em torno de 350 K, próxima da temperatura registrada no topo do gaseificador experimental, de 355,1 K.

As variações das descargas molares dos componentes gasosos mais significativos ao longo da altura do leito, provenientes da simulação, são apresentadas na Fig.6.8. A partir da curva de descarga do vapor d'água, pode-se

visualizar as diversas regiões existentes no gaseificador contracorrente simulado, identificadas na Tabela 6.10.

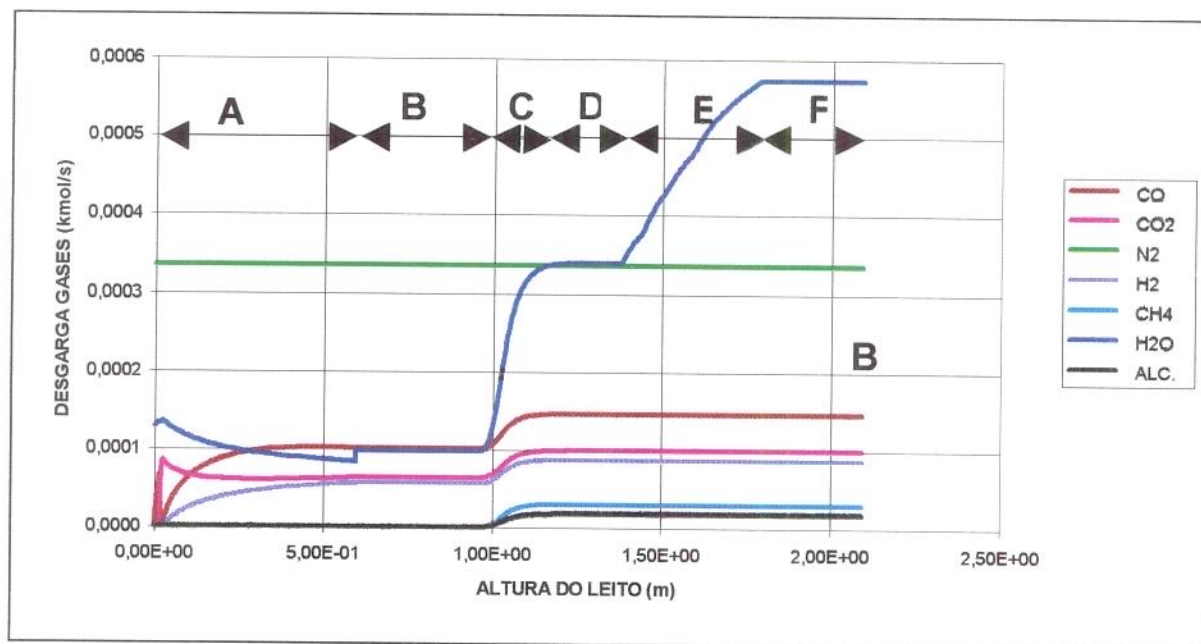


Fig. 6.8 Descargas dos principais componentes da fase gasosa ao longo da altura do gaseificador. Resultado de simulação.

Tabela 6.10 Identificação das regiões da Fig. 6.8.

Região	Identificação das regiões
A	Combustão e gaseificação
B	Região inerte
C	Pirólise
D	Aquecimento de pirólise
E	Secagem
F	Aquecimento

A região **A** engloba as regiões de combustão e gaseificação, nas quais observa-se uma redução na descarga de vapor d'água provocada pelas reações de 'shift' (R-7) e de gaseificação (R-2).

Na região **B** as cinéticas das reações de gaseificação tornam-se muito lentas em função da redução da temperatura da fase sólida. Por esta razão ela pode ser classificada como uma região inerte. Durante o ensaio experimental esta região pode ter atuado como um tanque pulmão de carvão, uma vez que, em ocasiões em que aconteceram problemas de interrupção da alimentação de cavacos, por um período não muito prolongado, não se observou variações acentuadas de composição nos gases do topo do leito. Este comportamento pode estar associado à existência deste "reservatório de carvão".

O trecho seguinte, **C**, corresponde à região de pirólise. Observe-se que, no modelo empregado, para partículas com 0,015 m de espessura, ele ocupa somente 0,2 m do gaseificador. Para partículas com espessuras maiores a extensão desta região tende a aumentar, como será visto mais adiante. A curva de descarga de água na fase gasosa tem uma elevação acentuada nesta região devido à liberação de água proveniente da decomposição de matéria volátil.

À região de pirólise segue-se uma região de aquecimento da biomassa, **D**. Nesta região a fase sólida se encontra totalmente seca e a cinética de pirólise é muito lenta, podendo ser desprezada. Esta região separa as regiões de pirólise e secagem, impedindo a superposição entre elas. Esta superposição, no entanto, pode vir a ocorrer no caso de se empregar cavacos com umidades e/ou espessuras maiores.

A região de secagem, **E**, ocupa uma extensão considerável do leito, em torno de 0,4 m e a descarga de vapor d'água, à semelhança do que acontece na região de pirólise, também sofre uma elevação significativa. No modelo desenvolvido por SOUZA SANTOS (1985) esta região era muito mais estreita e a

secagem ocorria quase que instantaneamente, por motivos já discutidos anteriormente.

O trecho final, **F**, representa a região de aquecimento dos cavacos alimentados, indo da temperatura ambiente até a temperatura de saturação da água. Nesta região não há secagem. Observe-se que, em função das baixas temperaturas da fase gasosa, este trecho também ocupa uma fração considerável da altura do leito do gaseificador, não podendo ser desprezado. No modelo de SOUZA SANTOS (1985) esta região não foi modelada.

6.3.3. Taxas de Reação.

a. Reações Heterogêneas.

As taxas das reações heterogêneas podem ser expressas em termos de fluxos molares de componentes gasosos passando através da superfície externa das partículas. As taxas das reações heterogêneas obtidas ao longo do leito, na simulação, são apresentadas na Fig. 6.9. As diversas regiões do gaseificador também podem aí ser identificadas.

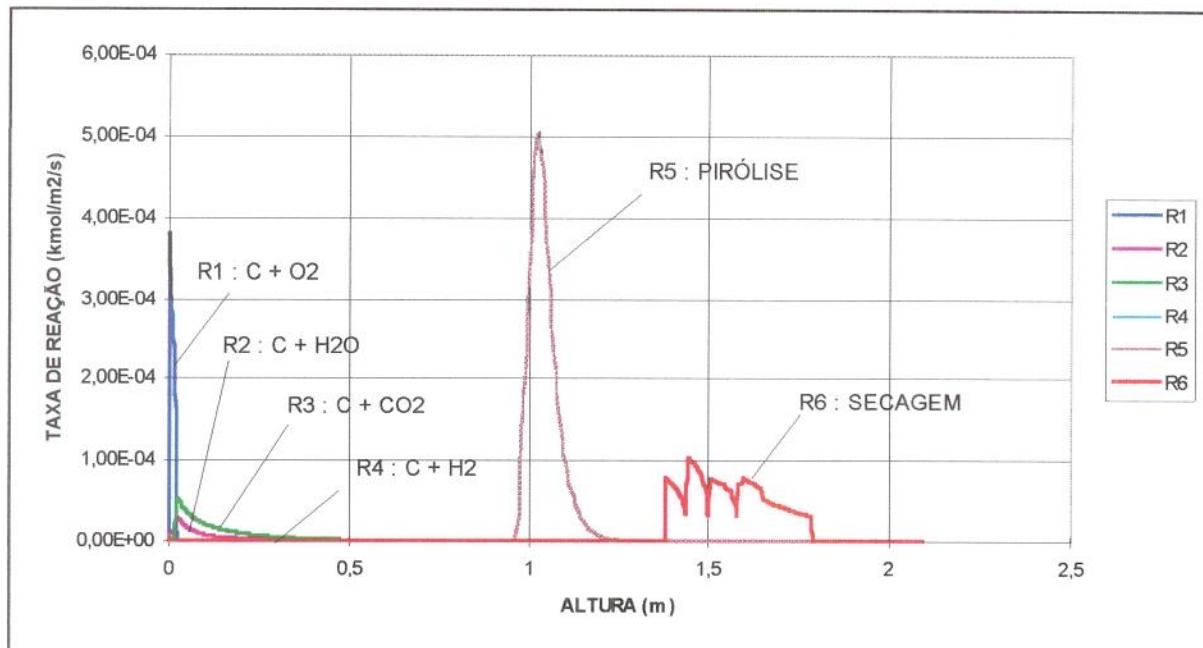


Fig. 6.9 Taxas de reações heterogêneas. Resultado de simulação.

Observe-se que a taxa de reação da pirólise, R-5, chega a atingir valores superiores aos da reação de combustão, R-1.

A reação de formação de metano, R-4, é praticamente nula nas pressões consideradas, não aparecendo na Fig.6.9.

Uma ampliação das regiões de combustão e gaseificação é apresentada na Fig. 6.10, onde se observa que a reação de combustão se anula na cota 0,025 m, e não há mais presença de oxigênio livre na fase gasosa.

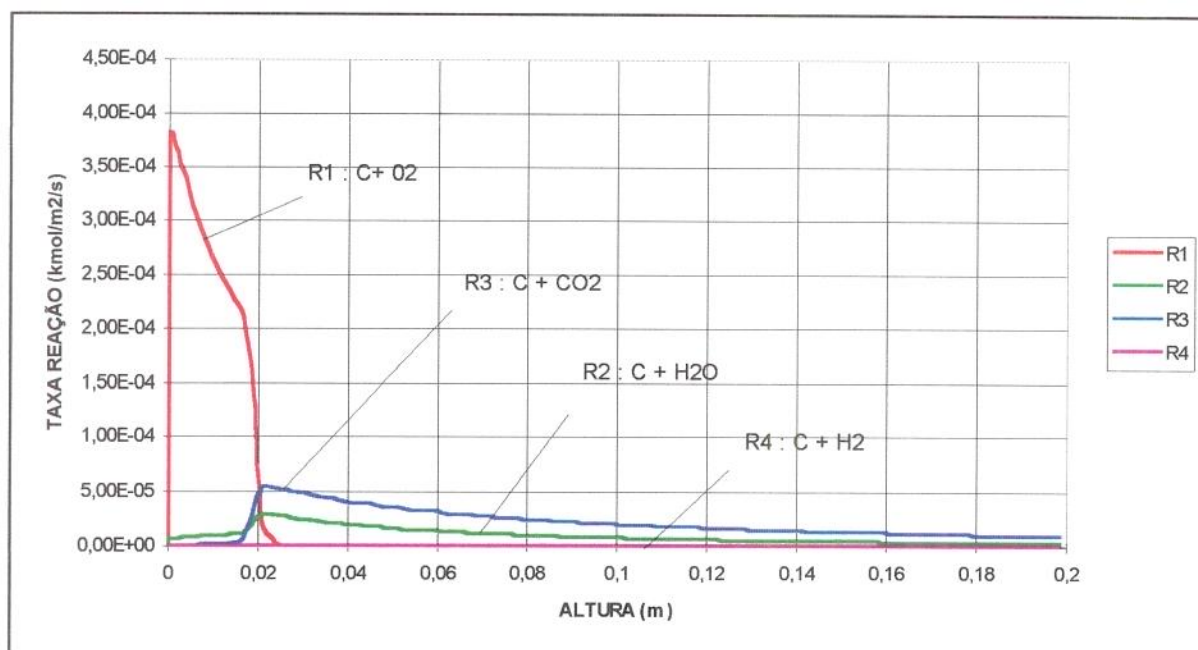


Fig. 6.10 Taxas de reações heterogêneas nas regiões de gaseificação e combustão. Resultado de simulação.

b. Reações Homogêneas.

As taxas de reações homogêneas mais importantes, (R-7) a (R-9), são apresentadas em unidades volumétricas, referidas à fase gasosa, na Fig. 6.11.

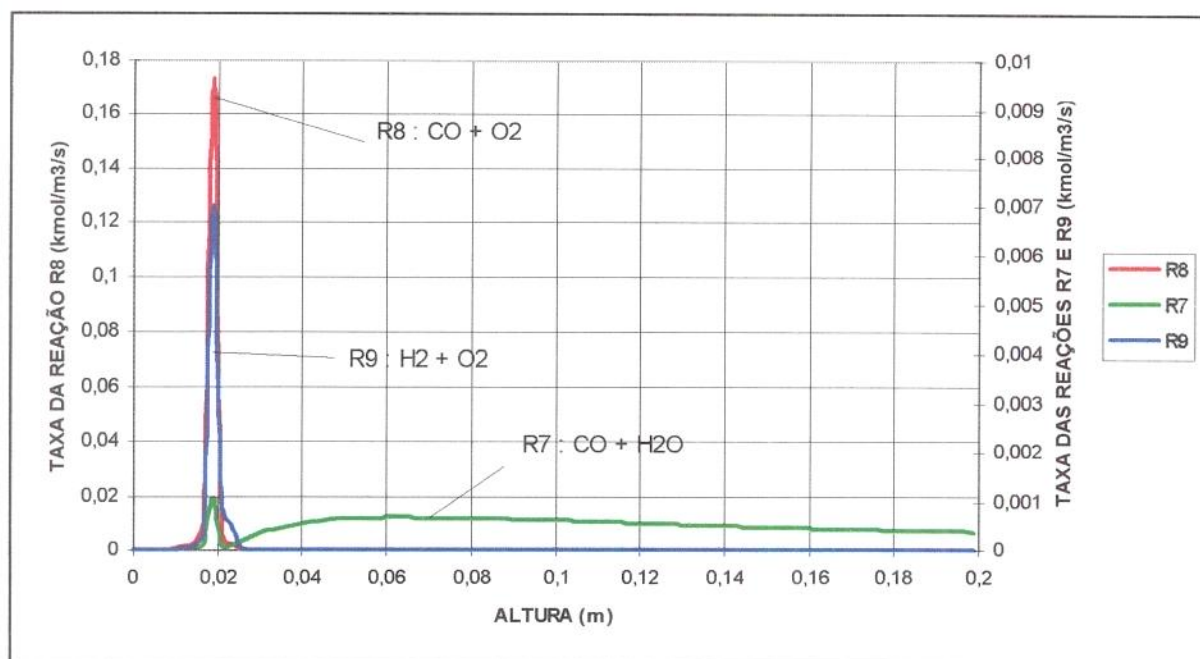


Fig. 6.11 Taxas de reações homogêneas na base do gaseificador. Resultado de simulação.

As reações de combustão praticamente se esgotam na cota 0,02 m enquanto que a reação de “shift”, R-7, se estende por toda a região de gaseificação.

6.3.4. Rendimento Térmico do Gaseificador.

A partir da composição experimental do gás combustível, apresentada na Tabela 6.7, da descarga de ar introduzida na base do gaseificador e de um balanço de massa de nitrogênio, pode-se calcular a descarga de gás combustível durante o ensaio experimental. Neste cálculo admite-se que não há liberação ou

absorção de nitrogênio pela fase sólida. A descarga calculada, para as condições experimentais, foi de $1,901 \cdot 10^{-2}$ kg/s.

O PCS do gás combustível frio e limpo pode ser calculado a partir das entalpias de formação dos componentes e dos seus produtos de combustão e é apresentado na Tabela 6.11. Nesta tabela também são apresentados os PCSs do cavaco de Eucalyptus e do carbono fixo, do gás e do alcatrão obtidos no ensaio experimental de pirólise em retorta metálica.

Tabela 6.11 Poder calorífico superior da madeira e dos produtos de pirólise.

PCS (J/kg)	
Madeira seca	$19,599 \cdot 10^6$
Gás comb. limpo e seco experimental	$6,382 \cdot 10^6$
Gás comb. limpo e seco simulado	$4,892 \cdot 10^6$
Carbono fixo	$32,371 \cdot 10^6$
Gás de pirólise	$14,877 \cdot 10^6$
Alcatrão	$34,525 \cdot 10^6$

Os PCSs da madeira e do carbono fixo foram obtidos experimentalmente, em bombas calorimétricas. O PCS do gás foi calculado a partir da composição e da entalpia de formação dos seus componentes, e o PCS do alcatrão foi estimado a partir da equação :

$$PCS_{alc} = \frac{PCS_m - \beta_c PCS_c - \beta_g PCS_g}{\beta_{alc}} \quad (6.1)$$

onde β_i é a fração mássica do componente i no produto de pirólise de cavacos de Eucalyptus, apresentada na Tabela 4.2. Nesta equação desprezou-se a entalpia de reação de pirólise.

A partir dos PCSs apresentados e das descargas calculadas pode-se determinar o rendimento do gaseificador. Este rendimento pode ser expresso em termos de gás frio e limpo - à temperatura ambiente e sem água e alcatrão - ou de gás quente - que considera, no seu cálculo, a entalpia sensível do gás e o PCS do alcatrão. Os rendimentos obtidos no ensaio experimental e na simulação são apresentados a seguir.

Tabela 6.12 Rendimentos obtidos.

Rendimento (%)	
Experimental : gás frio e limpo	40,4
Simulado : gás frio e limpo	30,1
Simulado : gás quente	68,5

O rendimento a frio experimental foi baixo provavelmente devido a baixa taxa de conversão de carbono fixo nas regiões de combustão e gaseificação - na simulação ela foi de 48,5 % em massa - e pela emissão de alcatrão com os gases combustíveis. O rendimento a frio simulado ficou abaixo do rendimento experimental, provavelmente devido à hipótese assumida de não haver decomposição de alcatrão na fase gasosa. No ensaio experimental parte do alcatrão proveniente da pirólise pode ter-se decomposto na fase gasosa, elevando o teor de componentes gasosos combustíveis e o seu PCS.

A baixa taxa de conversão de carbono fixo calculada deve-se à baixa relação de descargas de ar de gaseificação e de cavaco seco empregada no

ensaio experimental, que foi de 0,799 (kg ar/kg cavaco seco). REED (1983) apresenta algumas curvas de rendimento em função da relação de descargas, obtidas a partir da condição de equilíbrio termodinâmico em um reator adiabático gaseificando biomassa. Ele mostra que o rendimento é máximo para relações em torno de 1,5 e que a relação empregada no ensaio experimental implica na coexistência de uma fase sólida (carbono fixo) com os gases, típica de equipamentos de pirólise.

Parte da queda de eficiência do gaseificador se deve à energia perdida pelas paredes do gaseificador. O programa de simulação permite calcular o perfil de temperatura da parede externa do gaseificador e as perdas de calor. As curvas de temperatura e de potência perdida pela parede externa estão nas Figs.6.12 e 6.13.

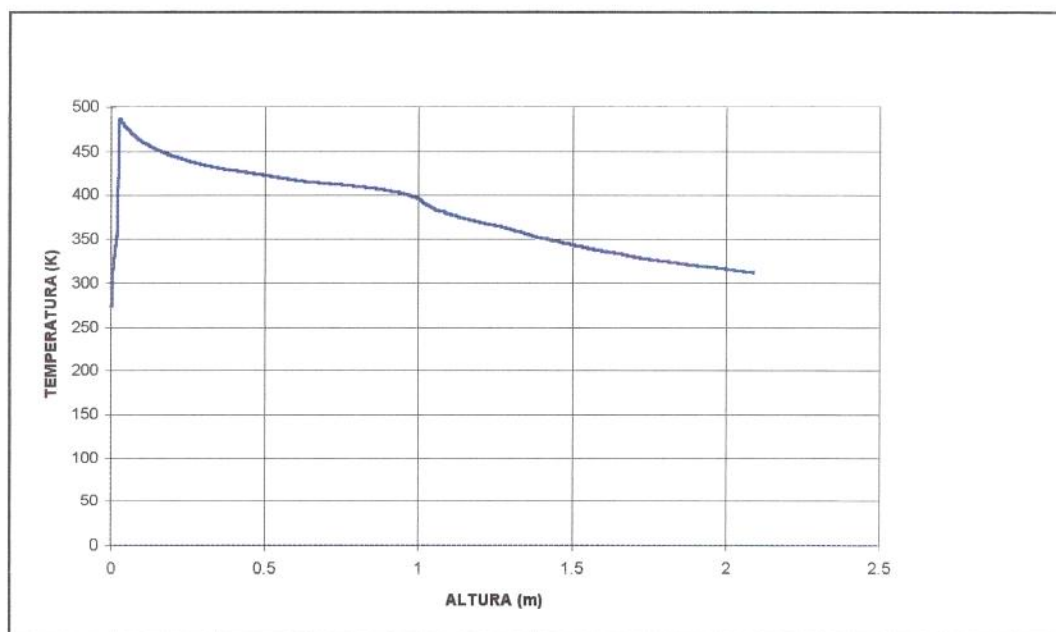


Fig. 6.12 Temperatura da parede externa do gaseificador. Resultado de simulação.

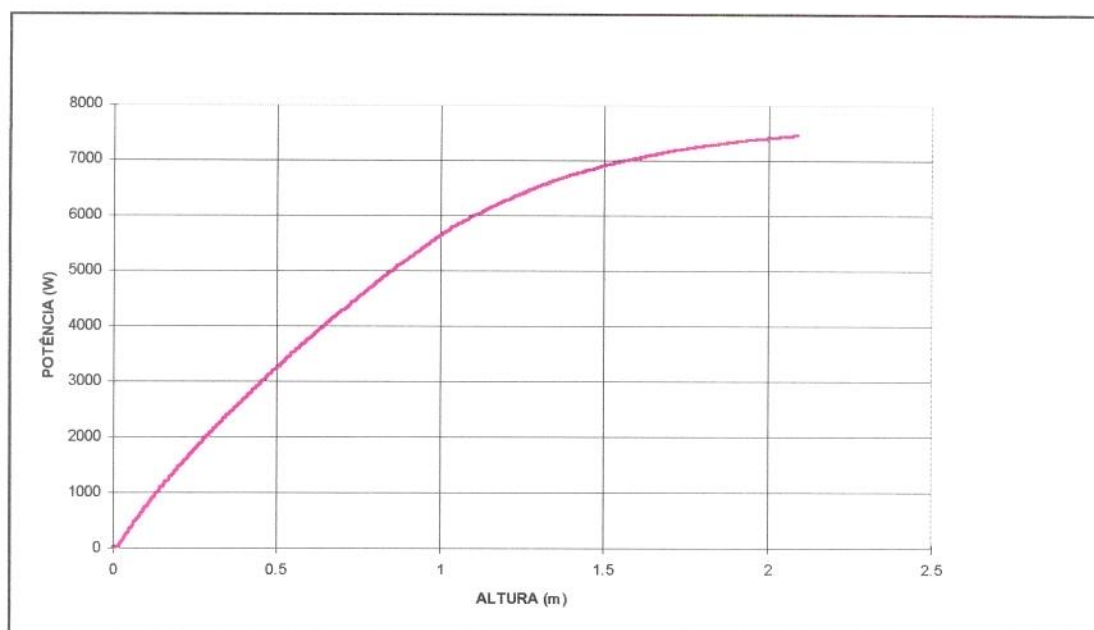


Fig. 6.13 Potência dissipada pela parede externa do gaseificador, acumulada a partir da base . Resultado de simulação.

As perdas acumuladas pela parede representaram uma queda de 2,53 % no rendimento obtido por simulação.

6.4. *Influência das Propriedades e das Condições do Combustível Alimentado sobre o Desempenho do Gaseificador.*

O modelo desenvolvido permite avaliar o efeito de vários parâmetros sobre o desempenho do gaseificador contracorrente padrão, operando nas condições do ensaio experimental. Para a presente avaliação selecionou-se a espessura e a umidade do cavaco alimentado.

Analizou-se também a sensibilidade do modelo à condutividade térmica do carbono fixo e à entalpia de reação de pirólise.

Saliente-se que a avaliação se restringe aos perfis de temperatura uma vez que os parâmetros selecionados, na maioria dos casos, pouco interferem na composição do gás no topo do gaseificador e na taxa de conversão de carvão na base do leito.

6.4.1. Efeito da Espessura do Cavaco Alimentado.

A influência da espessura do cavaco no comportamento do gaseificador pode ser observada na Fig. 6.14. A espessura padrão é igual a 0,015 m.

A redução da espessura para 0,010 m tende a reduzir a extensão de todas as regiões existentes no gaseificador contracorrente, a menos da região inerte existente entre as regiões de gaseificação e pirólise, como mostrado na Fig. 6.14(a). Isto significa que a altura do leito pode ser reduzida caso se empregue cavacos com espessuras menores, sem alterar o rendimento do gaseificador.

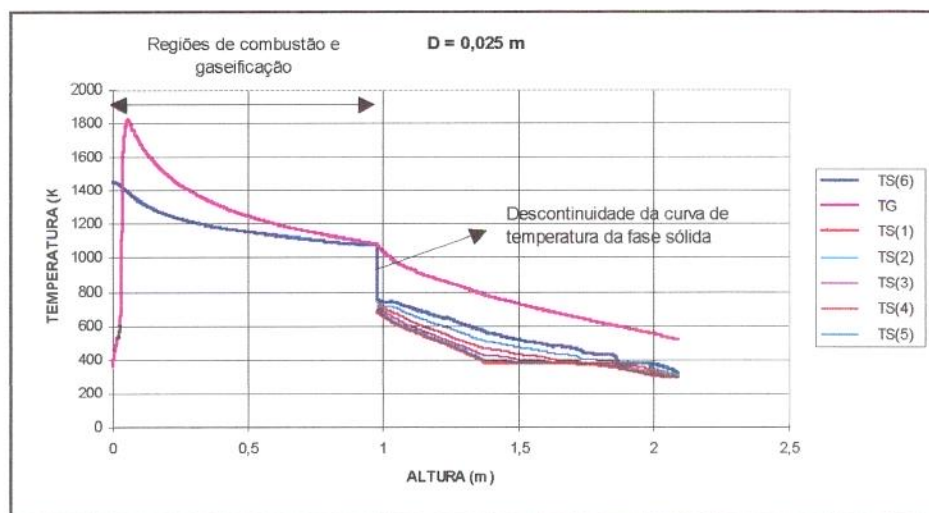
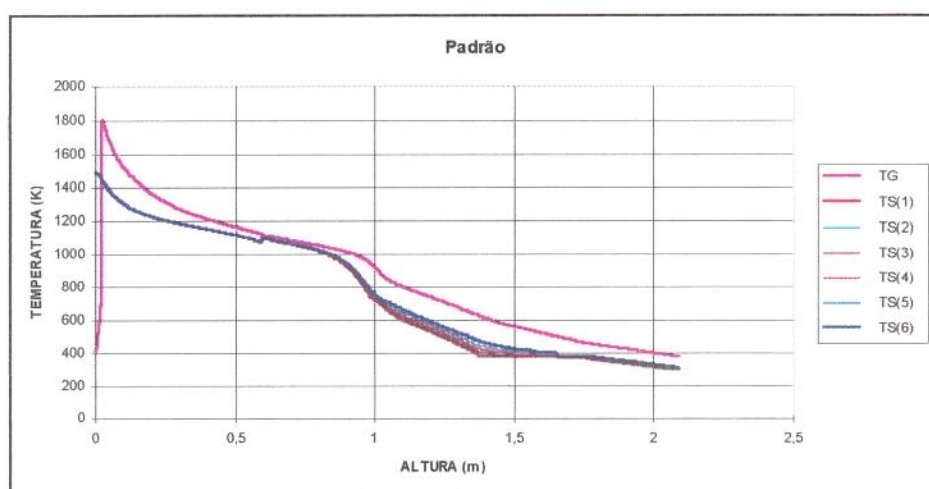
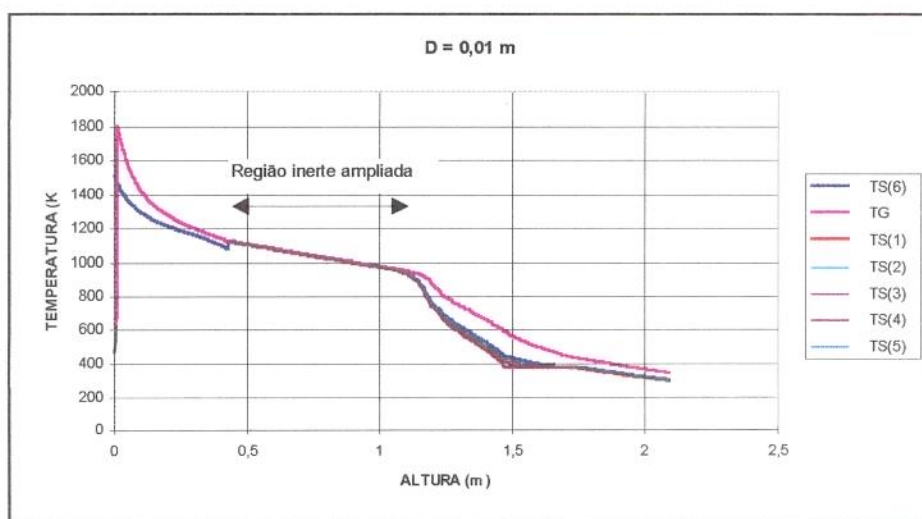


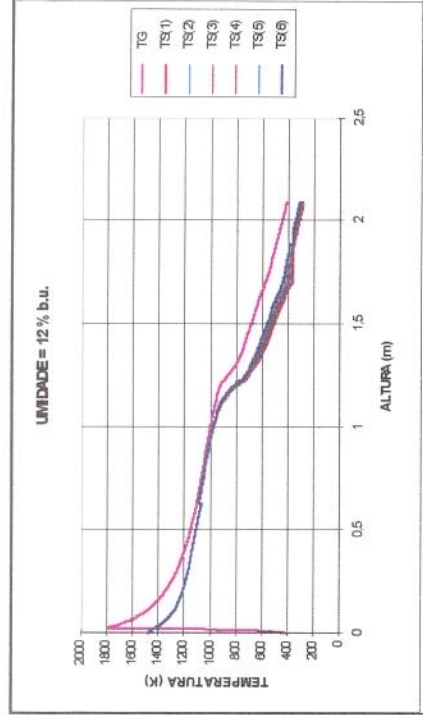
Fig. 6.14 Influência da espessura de cavaco nos perfis de temperatura.

A elevação da espessura tem o efeito inverso. Para a espessura de 0,025 m a Fig.6.14 (c) mostra que a altura do leito padrão, de 2,09 m, seria insuficiente para operar o gaseificador com o mesmo rendimento obtido no ensaio padrão. As regiões de combustão e gaseificação se estendem, devido à redução da área específica dos cavacos, o que também leva à redução da taxa global de consumo de carbono fixo nestas regiões. Desta forma, mantendo-se a altura do leito constante, o comprimento do leito disponível para realizar as etapas de aquecimento, secagem e pirólise sofre uma redução, tornando-se insuficiente para a efetivação destas etapas. Isto é caracterizado pela descontinuidade observada nas curvas de temperatura da fase sólida da Fig. 6.14 (c).

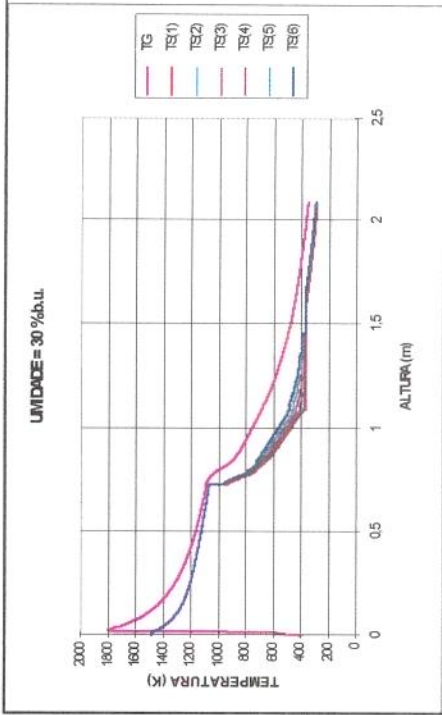
6.4.2. Influência da Umidade do Cavaco.

A umidade do sólido alimentado interfere significativamente na operação do gaseificador contracorrente, à semelhança da espessura de partícula. Na Fig.6.15 são apresentados os perfis de temperatura obtidos na simulação para várias umidades do cavaco.

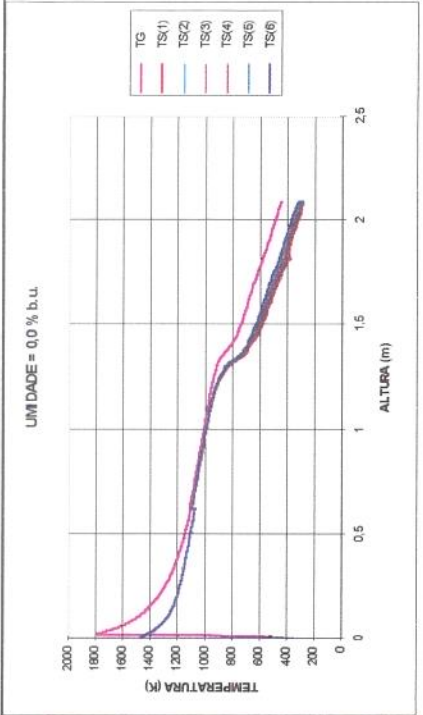
Como nas regiões de combustão e gaseificação somente existe material seco e pirolizado, sua simulação não é afetada pela variação da umidade das partículas, como ocorre no caso da variação da espessura.



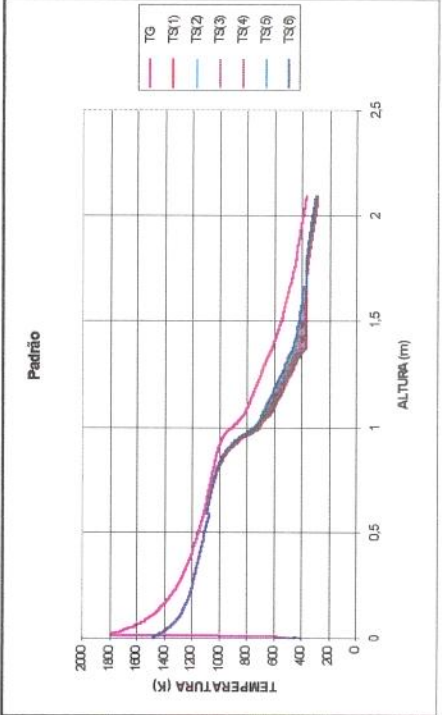
(a)



(b)



(c)



(d)

Fig. 6.15 Influência da umidade do cavaco sobre os perfis de temperatura ao longo do gaseificador.

A diminuição da umidade aumenta o comprimento da região inerte, localizada entre as regiões de gaseificação e pirólise. Para cavacos secos o aumento é máximo, indicando a possibilidade de se reduzir a altura do leito sem prejuízo do rendimento do gaseificador. Além disso, a temperatura dos gases no topo do gaseificador é mais elevada que a do caso padrão o que, num caso real, deve favorecer a elevação da taxa de decomposição de alcatrão em gases combustíveis, elevando o rendimento a frio do gaseificador.

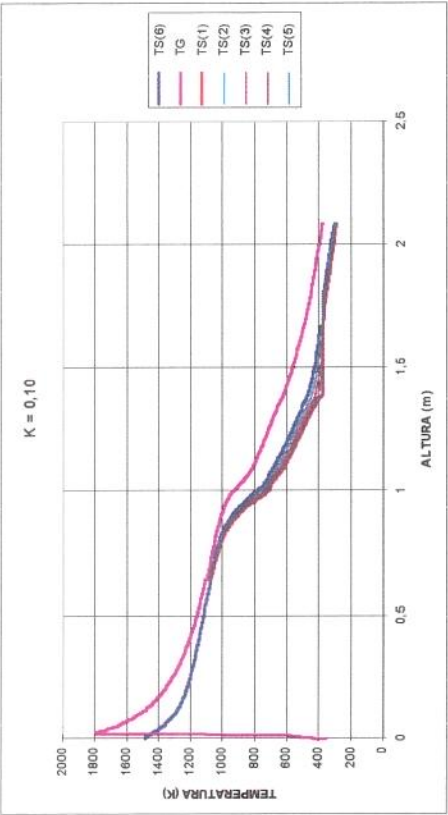
A descontinuidade observada na curva de temperatura da fase sólida da Fig. 6.15 (d), para umidade de 30 % b.u., indica a impossibilidade de se manter o mesmo rendimento obtido no caso padrão. A altura do leito padrão é insuficiente para completar a pirólise dos cavacos e o seu aumento, neste caso, pode ser inócuo, caso a temperatura dos gases no topo esteja próxima à de saturação. Observe-se que a umidade em discussão, de 30 %, está muito próxima da umidade do caso padrão, de 22,4 % b.u.

6.4.3. Influência da Condutividade Térmica do Carbono Fixo.

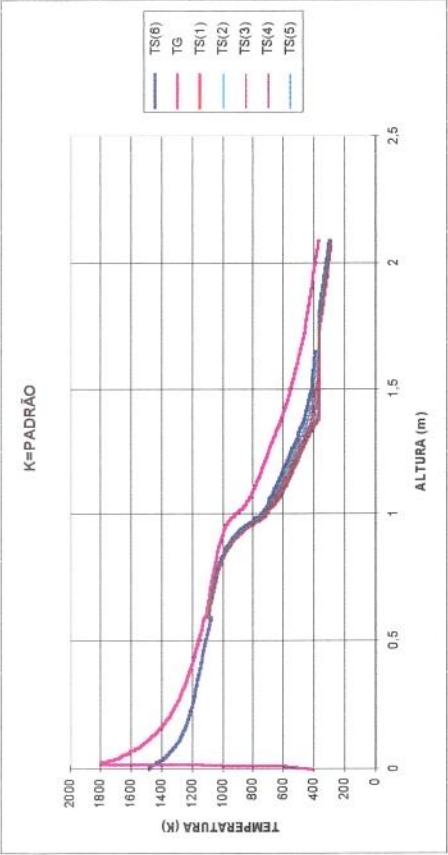
Na análise de tempos característicos, apresentada no Capítulo 2, um parâmetro considerado relevante na pirólise de biomassa foi a condutividade térmica do carbono fixo. A partir das curvas de temperatura da Fig. 6.16 observa-se, no entanto, que este parâmetro não é significativo na definição da extensão da região de pirólise e na condição de operação do gaseificador, pelo menos para partículas com espessura menor ou igual à utilizada no ensaio padrão. Na região de pirólise observa-se uma diminuição do gradiente de temperatura entre a superfície e o núcleo do cavaco, e uma aceleração da taxa de pirólise, que leva a uma ligeira redução na extensão da região de pirólise. Isto pode ser melhor

observado na Fig.6.17, que mostra as taxas de reação de pirólise obtidas para duas condutividades. Para a condutividade de $0,50 \text{ W/(m.K)}$ a taxa fica mais elevada, provocando uma ligeira redução da região de pirólise.

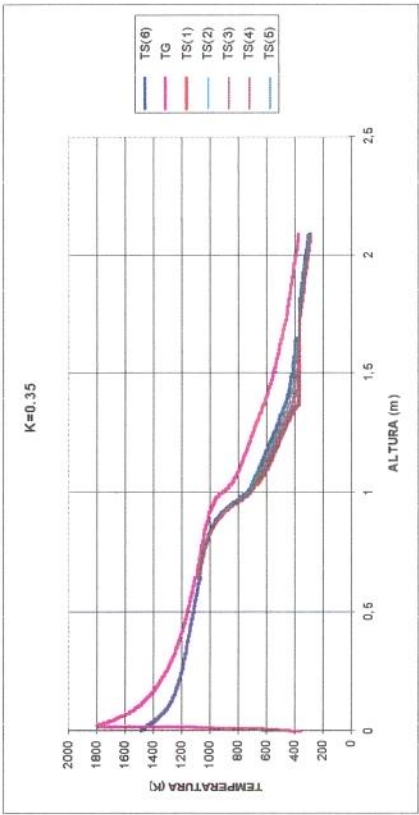
Nas regiões de combustão e gaseificação a alteração da condutividade de carbono fixo praticamente também não afeta os perfis de temperatura, uma vez que as partículas são consideradas isotérmicas ao longo da espessura e a troca de calor, ao longo da altura, se dá principalmente por radiação.



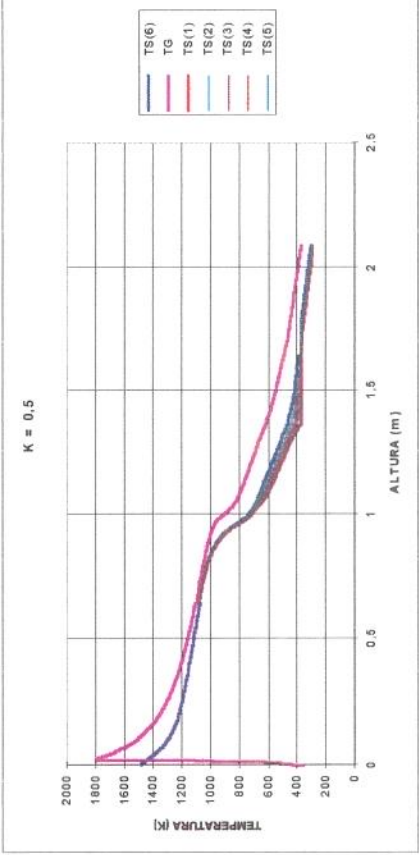
(a)



(b)



(c)



(d)

Fig. 6.16 Influência da condutividade térmica do carbono fixo no perfil de temperatura do gaseificador.

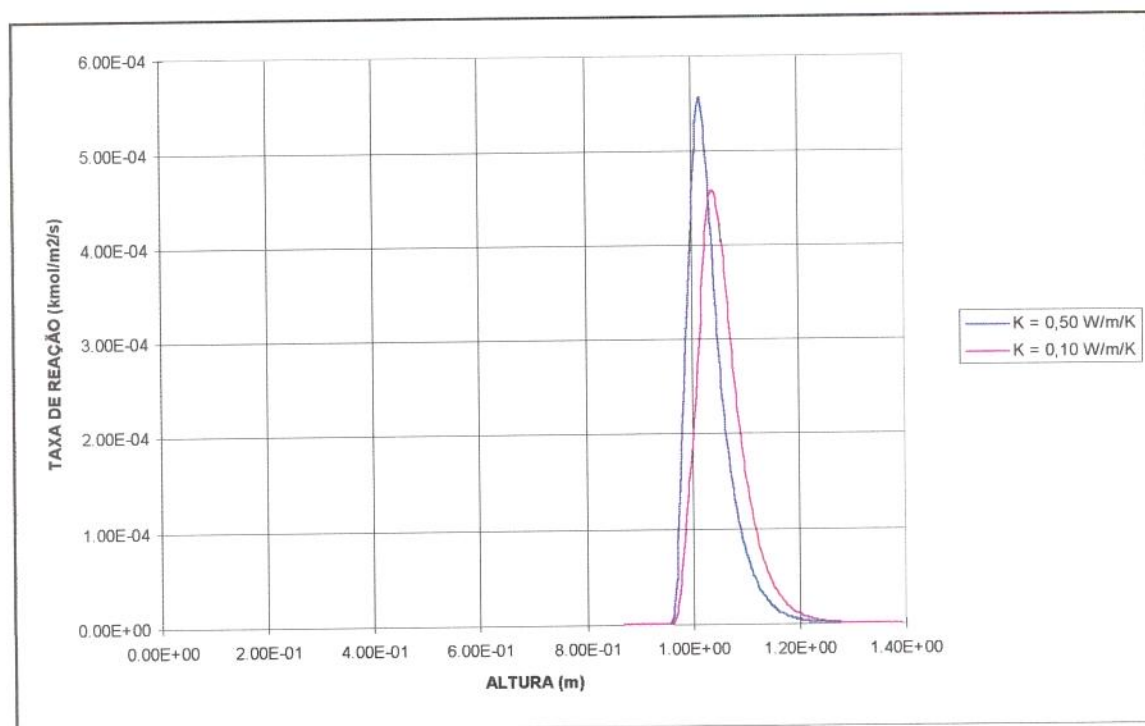
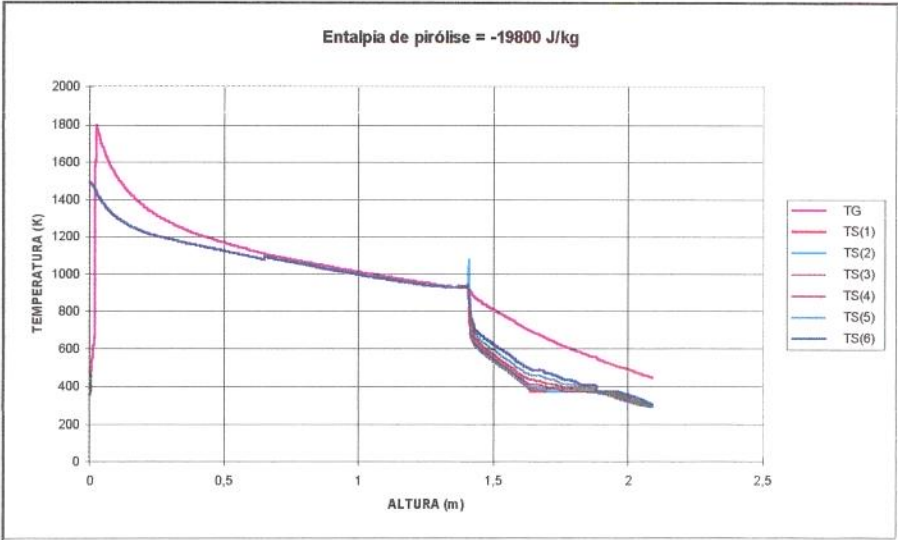


Fig. 6.17 Taxas de reação de pirólise obtidas para duas condutividades de carbono fixo.

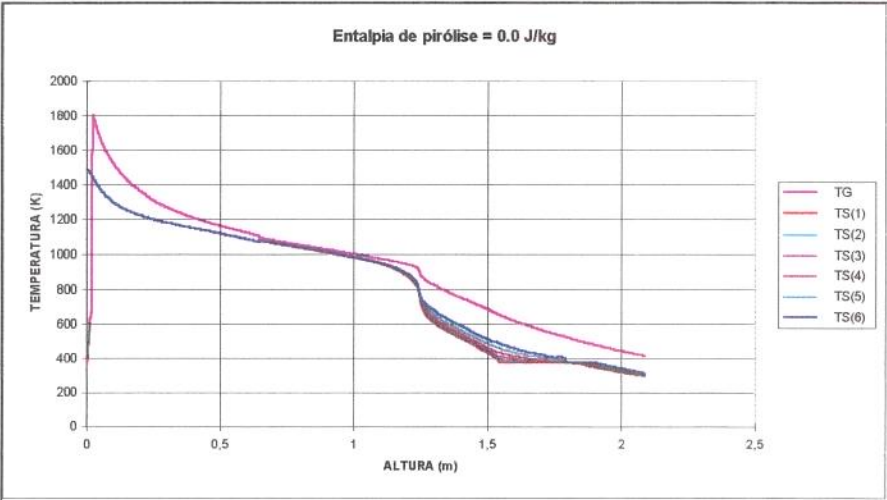
6.4.4. Influência da Entalpia de Reação de Pirólise.

A influência do valor da entalpia de pirólise adotado, bem como sua natureza endotérmica ou exotérmica, pode ser observada na Fig. 6.18.

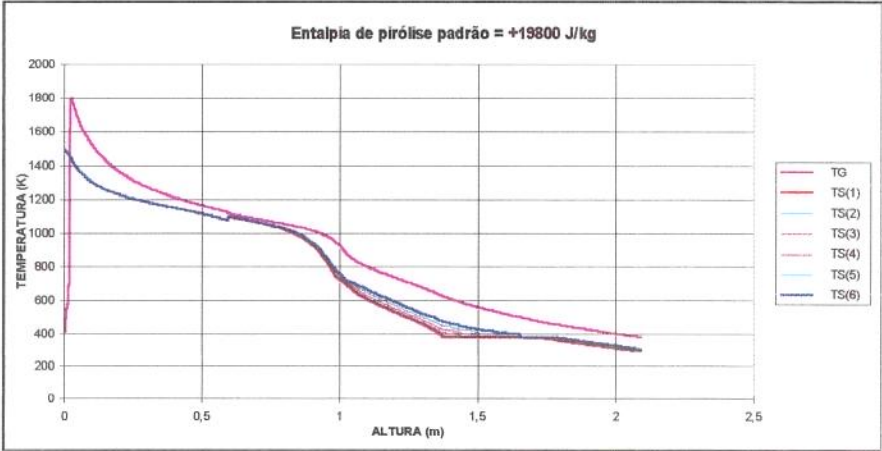
Uma reação de pirólise exotérmica provoca uma diminuição significativa na extensão da região de pirólise, como pode ser observado na Fig. 6.18 (a). Para o valor adotado na simulação, de $-1,98 \cdot 10^5$ J/kg, a temperatura da fase sólida chega a atingir temperaturas maiores que as da fase gasosa na região de pirólise. Este fato, que não foi observado no ensaio experimental, e a posição relativamente elevada da região de término de pirólise obtida na simulação ($\sim 1,35$ m), reforça a



(a)



(b)



(c)

Fig. 6.18 Sensibilidade do modelo ao valor da entalpia de reação de pirólise.

validade dos dados experimentais de HAVENS (1972), que obteve valores negativos para a reação de pirólise.

A hipótese de reação de pirólise endotérmica, com entalpia de reação igual à empregada no caso padrão, foi a que mais se aproximou dos dados experimentais entre os casos analisados. Os perfis de temperatura obtidos são apresentados na Fig. 6.18 (c),

6.5. *Influência do Número de Passos de Integração ao Longo da Espessura e Altura das Partículas nas Regiões de Pirólise, Secagem e Aquecimento.*

Na integração de equações diferenciais parciais pelo método de diferenças finitas, modo explícito, existe uma relação mínima a ser observada entre o comprimento dos passos dados na direção y e na direção z para que a integração seja convergente. Por exemplo, no caso padrão, quando se empregou um número de passos na direção z de 10000 e de 5 na direção y o programa convergiu. Para valores acima de 9 em y , mantendo o número de passos em z , o programa não convergiu.

Para avaliar o efeito do número de passos no resultado da simulação, simulou-se a condição padrão com um número de passos maior na direção y , 10, e na direção z , 100000. Esta condição apresentou convergência e os perfis de temperatura obtidos são apresentados na Fig. 6.19.

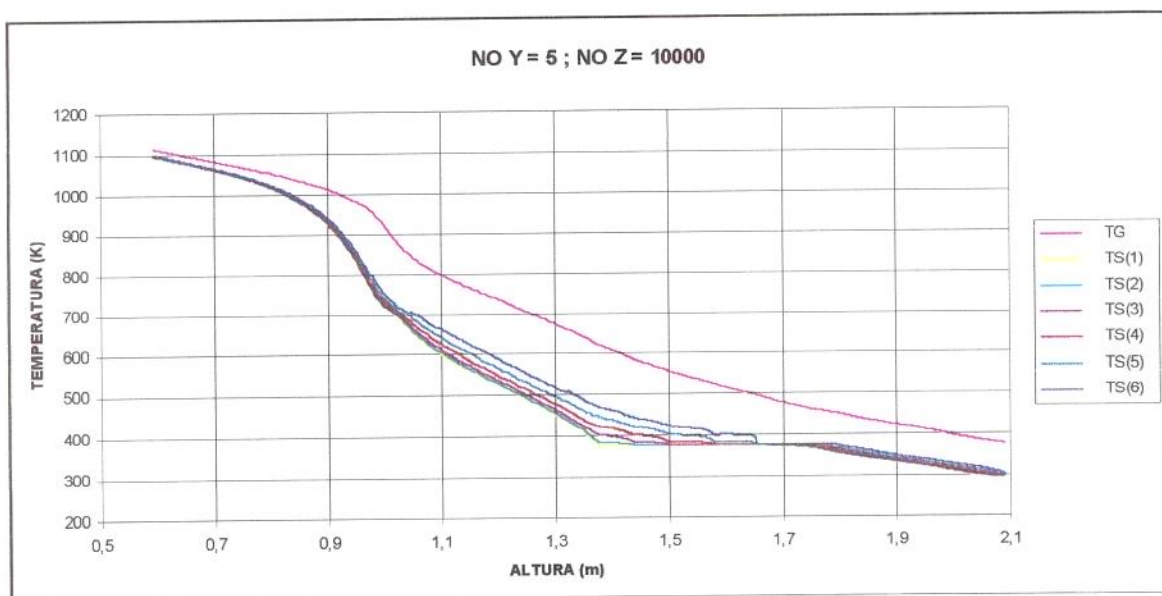
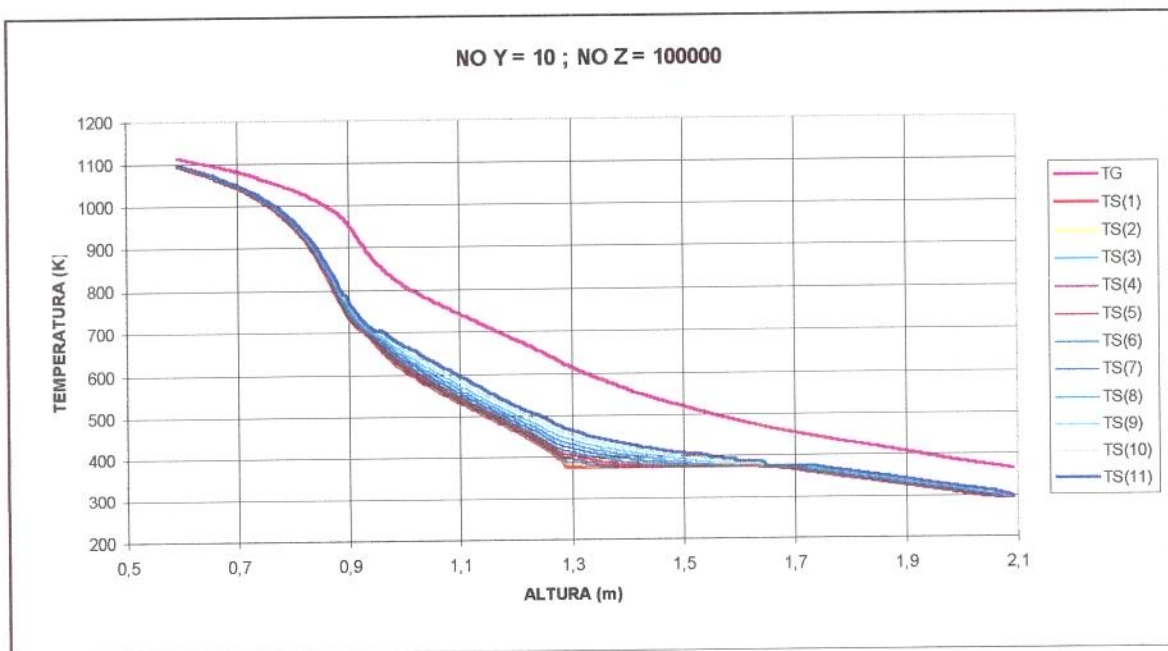


Fig. 6.19 Influência da variação do número de passos nos perfis de temperatura das regiões de pirólise, secagem e aquecimento.

Observe-se que houve um pequeno deslocamento das curvas de temperatura para a esquerda, reduzindo a extensão da região inerte localizada entre a região de gaseificação e pirólise. Estes perfis, apesar de aparentemente estarem mais próximos do perfil experimental, consomem um tempo de processamento maior para serem obtidos. Para se ter uma idéia, em um computador PC 486 de 66 MHz, o tempo de processamento foi cerca de 10 vezes maior que o do caso padrão, levando cerca de 40 h. Como os resultados obtidos diferiram pouco do caso padrão, optou-se por empregar o número de passos do caso padrão para realizar a análise de sensibilidade do modelo desenvolvido.

Capítulo 7

7. CONCLUSÕES E SUGESTÕES.

7.1. Conclusões.

O presente trabalho teve como objetivo principal o estudo da pirólise, secagem e aquecimento de biomassa em um gaseificador de leito movente contracorrente.

Um modelo bidimensional foi desenvolvido a nível das equações fundamentais e seus resultados foram comparados com dados experimentais disponíveis e com dados de modelo unidimensional existente na literatura.

Foram propostas alternativas mais próximas da descrição da fenomenologia envolvida no processo. Para efeito da modelagem desenvolvida o gaseificador foi considerado composto por cinco regiões principais : aquecimento, secagem, pirólise, gaseificação e combustão, e duas fases : sólida e gasosa.

a) Região de aquecimento, secagem e pirólise.

O modelo apresentado é, tanto quanto se saiba, o primeiro a dar um tratamento bidimensional às regiões de aquecimento, secagem e pirólise em um gaseificador contracorrente. São mais freqüentes as modelagens de partículas isoladas, com o estudo de perfis de concentração e temperatura ao longo do raio da partícula e do tempo.

Graças a este procedimento o modelo desenvolvido permite visualizar com clareza as diversas regiões existentes em um gaseificador contracorrente operando com cavacos de madeira e prever, com razoável precisão, a extensão de cada uma no interior do leito.

Outros procedimentos significativos adotados foram :

- Adoção de transporte de massa convectivo, dominante em relação ao difusivo, na pirólise e secagem;
- Consideração do efeito de transporte de massa, correspondente à saída de vapor d'água e produtos de pirólise pela superfície do cavaco; no coeficiente de película de transferência de calor na superfície do cavaco.
- Consideração da existência de uma frente de secagem se deslocando da superfície para o interior do cavaco, com o reconhecimento da existência de gradientes de temperatura antes e depois da frente;
- Utilização de dados experimentais de pirólise de cavacos na definição da composição dos produtos de pirólise ao invés de uma proposta de composição ajustada.

Para efeito de simplificação de cálculo foram feitas as hipóteses seguintes :

- A transferência de calor por condução na fase sólida, na direção z , não foi considerada e
- A única reação considerada nas regiões de pirólise, secagem e aquecimento foi a de pirólise, R-5.

Estas simplificações foram adotadas porque as temperaturas observadas nestas regiões, relativamente baixas, em geral levam a taxas de transferência de calor por condução e velocidades de reação desprezíveis.

O tratamento bidimensional dos cavacos permitiu obter perfis de temperatura no cavaco ao longo da altura do leito e da espessura, constatando-se a formação de gradientes apreciáveis de temperatura nas regiões de secagem e pirólise, o que enfraquece a validade da hipótese de cavaco isotérmico para espessuras da ordem de 0,015 m.

Os dados experimentais de temperatura disponíveis permitem validar a tendência de queda acentuada das curvas de temperatura obtidas via simulação nas regiões de pirólise, secagem e aquecimento (Fig.6.2).

A diferença entre os níveis de temperatura simulados e os experimentais, observada nas regiões de pirólise, secagem e aquecimento, é conseqüência das baixas temperaturas obtidas para as fases sólida e gasosa ao fim da região de gaseificação. Caso estas temperaturas fossem mais elevadas o ajuste dos perfis de temperatura simulados aos perfis experimentais teria sido maior.

b) Região de combustão e gaseificação.

A modelagem das regiões de combustão e gaseificação difere basicamente do modelo desenvolvido por SOUZA SANTOS pela consideração da condução de calor na fase sólida, ao longo do eixo do gaseificador. Além disso, as condições de contorno propostas procuraram se aproximar das condições existentes no gaseificador real, reduzindo a utilização de ajuste empíricos. Os resultados obtidos permitem concluir que :

- A análise de sensibilidade à condutividade do carbono fixo (Fig. 6.16), mostrou que a consideração da condução de calor na direção axial não é significativa;
- A curva de temperatura e a cota correspondente ao ponto de temperatura máxima da fase gasosa calculada pelo modelo, não pode ser plenamente verificada pela inexistência de dados experimentais adequados entre as cotas 0 e 0,26 m (Fig.6.2).
- As curvas de temperatura simuladas, em relação às obtidas por SOUZA SANTOS, diferem fundamentalmente na localização dos pontos de temperatura máxima das fases sólida e gasosa, o que decorre das condições de contorno adotadas em $z=0$.

Embora as curvas de composição da fase gasosa e os perfis de temperatura obtidos na simulação ainda apresentem desvios em relação às curvas experimentais, o modelo proposto avança no sentido de melhor detalhar a fenomenologia envolvida, partindo tanto quanto possível das equações fundamentais, e permitindo prever situações diversas de operacionalidade do gaseificador.

7.2. Sugestões para Outros Trabalhos.

Diversas propostas de desenvolvimento posterior do modelo foram apresentadas ao longo do texto, das quais pode-se destacar :

- Tratamento bidimensional não isotérmico da fase sólida nas regiões de combustão e gaseificação;
- Variação de concentração de carbono ao longo da espessura da fase sólida na região de gaseificação, adotando um modelo intermediário ao de núcleo exposto e núcleo não reagido;
- Variação da porosidade do leito nas regiões de combustão e gaseificação;
- Incorporação de outras propostas de cinética na região de gaseificação;
- Incorporação de estequiometria e cinética de decomposição de alcatrão no interior da fase sólida e da fase gasosa;
- Desenvolvimento de modelo para cavacos com outras geometrias (cilíndrica e esférica);
- Consideração de outros métodos numéricos de resolução de sistemas de equações diferenciais;
- Avaliação da influência da velocidade de aquecimento, variando o coeficiente de película de troca de calor;

- Simulação da gaseificação de outros materiais como carvão mineral, turfa, bagaço de cana etc.;
- Estudo das condições de contorno na base do gaseificador e
- Levantamento de dados experimentais mais detalhados ao longo da altura do gaseificador, particularmente nas regiões de combustão e gaseificação, com o levantamento de perfis de temperatura e composição e a comprovação da existência de regiões inertes.

O modelo desenvolvido de pirólise, secagem e aquecimento pode ser empregado, com pequenos ajustes, na simulação de outros tipos de equipamento, como gaseificadores concorrentes e de leito fluidizado, fornos de pirólise contínuos, secadores de alta temperatura, fornalhas e incineradores, todos operando com sólidos de granulometria acima de 0,001 m, para os quais a hipótese de partícula isotérmica deixa de ser razoável.

Nos incineradores de resíduos sólidos o modelo pode ser empregado para prever a curva de aquecimento de uma partícula de resíduo ao longo do incinerador e definir o comprimento e as condições operacionais necessários para garantir o seu consumo no interior do incinerador e a destruição dos compostos poluentes.

Referências Bibliográficas

- AKITA, K., "Studies on the mechanism of ignition of wood", Report of Fire Research Institute of Japan, N° 9; 1959, citado em L. E. BROWN, (1972).
- ALVES, S.S., FIGUEIREDO, J.L., "A model for pyrolysis of wet wood", Chemical Engineering Science; Vol 44, N° 12; pp. 2861-2869; 1989.
- ANTAL, M.J.; "A review of the gas phase pyrolysis of biomass derived volatile matter"; OVEREND, 1982.
- ARTHUR, J.A., "Reactions between carbon and oxygen", Trans. Faraday Soc., 47, pp. 164-178, 1951, citado em M. SOUZA SANTOS (1985).
- BAMFORD, C.H., CRANK, J., MALAN, D.H., "The combustion of wood, Part I.", Proc. of Cambridge Phil. Soc., 42 (1946), 166, citado por L. E. BROWN (1972).
- BIRD, R.B., STEWART, W.E., LIGHTFOOT, E.N., "Transport phenomena", John Wiley & Sons, 1960.
- BROWN, L.E., "An experimental and analytic study of wood pyrolysis", The University of Oklahoma, USA, Ph.D. Thesis, 198 p, 1972.

- CAPART, R., FALK, L., GELUS, M., "Pyrolysis of wood macrocylinders under pressure : Application of a simple mathematical model", *Applied Energy*, 30, pp.1-13, 1988.
- CHAN, W.R., KELBON, M., KRIEGER, B.B., "Modelling and experimental verification of physical and chemical processes during pyrolysis of a large biomass particle", *Fuel*, Vol 64, Nov., 1985, pp.1505-1513.
- CHEN, J.S., GUNKEL, W.W., "Modeling and simulation of co-current moving bed gasification reactors - Part I. A non-isothermal particle model", *Biomass* 14, pp. 51-72, 1987.
- CHOO, Y.S., JOSEPH, B., "Heterogeneous model for moving-bed coal gasification reactors", *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 20, pp. 314-318, 1981.
- DE SAI, P.R., WEN, C.Y., "Computer modeling of Morgantown Research Center's fixed bed gasifier", Morgantown, West Virginia Technical Information Center United States Department of Energy, MERC/CR-78/3, 130 p., Mar. 1978.
- FIELD, M. A., GILL, D. W., MORGAN, B. B., HAWKSLEY, P. G. W., "Combustion of pulverized fuel", *Brit. Coal Utiliz. Res. Assoc. Mon. Bull.*, 31, 6, pp. 285-345, 1967, citado em DE SAI, P.R. e WEN, C.Y. (1978).
- GIBSON, M.A., EUKER, C.A., "Mathematical modelling of fluidized bed coal gasification", *AIChE Meeting*, Los Angeles, CA, USA, 1975.
- GUPTA, A.S., THODOS, G., "Direct analogy between mass and heat transfer to beds of spheres", *AIChE Journal*, 9, 6, pp. 751-754, Nov. 1963.

- HAJALIGOL, M.R., HOWARD, J.B., LONGWELL, J.P., PETERS, W.A., "Product compositions and kinetics for rapid pyrolysis of cellulose", Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., 21, pp. 457-465, 1982.
- HASLAN, H.C., RUSSEL, R.P., "Fuel and their combustion", N.Y., MacGraw Hill, 809 p, 1926.
- HAVENS, J.A., "Thermal decomposition of wood", Unpublished Ph.D. dissertation, University of Oklahoma, Norman, Oklahoma, 1965, citado em BROWN, L.E (1972).
- HOTTEL, H.C., HOWARD, J.B., "New energy technology", MIT Press, Cambridge, Mass., 1971.
- HUGHES, R., DEUMAGA, V., "Insulation saves energy", Chem. Eng., 27, pp. 95-100, May 1974.
- IDEL'CIK, I.E., "Memento des Pertes de Charge", tradução do russo por Meury, M., Paris, Eyrolles, 494 p., 1960.
- IPT- INSTITUTO DE PESQUISAS TECNOLÓGICAS DO ESTADO DE SÃO PAULO S.A., "Apoio técnico, pesquisa e desenvolvimento para produção de gás de síntese a partir de Eucalyptus SPP - Fase 1a", Relatório nº 12.723, 1979.
- JOHNSON, J.L., "Kinetics of coal gasification", J. Wiley and Sons, 324p., 1979.
- KANURY, A. M., "An evaluation of the physico-chemical factors influencing the burning rate of cellulosic fuels and a comprehensive model for solid fuel pyrolysis and combustion", Unpublished Ph.D. dissertation, University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota, 1969, citado em BROWN, L. E (1972).

- KARAPETYANTS, M. Kh., "Chemical Thermodynamics", Moscow, Mir, 690 p., 1978.
- KUNG, H.C., "A mathematical model of wood pyrolysis", Combustion and Flame 18, pp.185-195, 1972.
- MOE, J.M., "Design of water-gas shift reactors", Chem. Eng. Progress, 58, 3, pp. 33-36, Mar., 1962.
- NUNN, T.R., HOWARD, J.B., LONGWELL, J.P., PETERS, W.A., "Product compositions and kinetics in the rapid pyrolysis of Sweet Gum Hardwood", Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., 24, pp. 836-844, 1985.
- NUNN, T.R., HOWARD, J.B., LONGWELL, J.P., PETERS, W.A., "Product compositions and kinetics in the rapid pyrolysis of milled wood lignin", Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., 24, pp. 844-852, 1985.
- PARENT, R.H., KATZ, S., "Equilibrium compositions and enthalpy changes for the reaction of carbon, oxygen and steam", IGT-Research Bulletin, 2, Jan., 1948, citado em SOUZA E SANTOS,M (1985).
- PERRY, R. H., CHILTON, C. H., "Chemical Engineer's Handbook", 5th ed., Mc Graw Hill, 1973.
- REED, T.B., "The scientific basis of gasifier design", Forest Products Research International, Praetoria, South Africa, April 22, 1983.
- ROSSBERG, M., "Experimental results concerning the primary reactions in the combustion of carbon", Z. Electrochem., 60, 952-956, 1956, citado em SOUZA SANTOS,M (1985).

- SERGEANT, G.D., SMITH, I.W., "Combustion rate of bituminous coal char in the temperature range 800 to 1700 K", *Fuel*, 52, 52-77, 1973.
- SERIO, M.A., PETERS, W.A., HOWARD, J.B., "Kinetics of vapor-phase secondary coal pyrolysis tars", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 26, pp. 1831-1838, 1987.
- SMOOT, L.D., PRATT, D.T., "Pulverized coal combustion and gasification", Plenum Press, N.Y., 1979.
- SOUZA SANTOS, M., "Desenvolvimento de modelo de simulação e otimização de gaseificadores com diversos tipos de combustíveis", Secretaria de Tecnologia Industrial/Ministério da Indústria e Comércio, Relatório, Nº 20.689, 1985.
- SOUZA SANTOS, M., JEN L.C., "Modelagem e simulação de gaseificador de leito fixo para carvão", *Revista Brasileira de Engenharia Química*, pp. 18-23.
- STILLMAN, R., "Simulation of a moving bed gasifier for a western coal", *IBM J. Res. Develop.*, 1979, v23, no 3, 240.
- THURNER, F., MANN, U., "Kinetics investigation of wood pyrolysis", *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 20, pp. 482-448, 1981.
- TIEN, C.L., "Thermal radiation in packed and fluidized beds", *Journal of Heat Transfer*, Vol.110, Nov., pp. 1230-1242, 1988.
- WALKER, P.L.Jr, RUSINKO, F.Jr, AUSTIN, L.C., "Gas reaction of carbon", *Advan. Catalysis*, 2, 134, 1959.
- WEN, C.Y., CHEN, L.H., "A model for coal pyrolysis in an inert atmosphere", *J. Chinese Inst. Chemical Eng.*, 14, pp. 173-189, 1983, citado por SOUZA SANTOS, M. (1985).

- WEN, C.Y., LEE, E., "Coal Conversion Technology (in "Energy Science and Technology")", Addison-Wesley, 586 p., 1979.
- YAWS, C.L., BORRESON, R.W., GORIN, C.E., HOOD, L.D., MILLER, J.W., SCHORR, G.R., THAKORE, S.B., "Correlation constants for chemical compounds (22)", Chem. Eng., 16, 79, pp. 79-87, Aug. 1976 (a).
- YAWS, C.L., BORRESON, R.W., GORIN, C.E., HOOD, L.D., MILLER, J.W., SCHORR, G.R., THAKORE, S.B., "Correlation constants for chemical compounds (23)", Chem. Eng. 25, pp.127-135, Oct. 1976 (b).
- YAWS, C.L., BORRESON, R.W., GORIN, C.E., HOOD, L. D., MILLER, J.W., SCHORR, G.R., THAKORE, S.B., "Correlation constants for chemical compounds (24)", Chem. Eng., 22, pp. 153-162, Nov. 1976 (c).
- YOON, H., WEI, J., DENN, M.M., "A model for moving-bed coal gasification reactors", AIChE Journal, v24., pp. 885-903, Sep., 1978.

ESTE TRABALHO CORRESPONDE À REDAÇÃO FINAL DA
TESE DEFENDIDA POR Ademar Hakuo Ushima
E APROVADA PELA
COMISSÃO JULGADORA EM 21 / 06 / 1996
Leonardo Goldstein Jr
ORIENTADOR

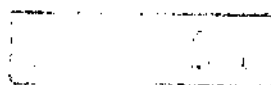
**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA**

Modelagem e Simulação de Pirólise e Secagem de Biomassa em um Gaseificador de Leito Movente Contracorrente

Volume II

**Autor: Ademar Hakuo Ushima
Orientador: Leonardo Goldstein Jr.**

Campinas, 1996
S.P. - Brasil



**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA TÉRMICA E FLUIDOS**

Modelagem e Simulação de Pirólise e Secagem de Biomassa em um Gaseificador de Leito Movente Contracorrente

Autor: Ademar Hakuo Ushima
Orientador: Leonardo Goldstein Jr.

Curso: Engenharia Mecânica
Área de Concentração: Térmica e Fluidos

Dissertação de mestrado apresentado à comissão de Pós Graduação da Faculdade de Engenharia Mecânica, como requisito para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Campinas, 1996
S.P. - Brasil

UNIDADE	BC
N.º CHAMADA:	
V.	02
T.	38226
PRE.	229/99
PRE.	R\$ 11,00
DATA	10/08/99
N.º CPD	

cm 001255541

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

U3m
2v.

Ushima, Ademar Hakuo
Modelagem e simulação de pirólise e secagem de
biomassa em um gaseificador de leito movente
contracorrente / Ademar Hakuo Ushima. —Campinas,
SP: [s.n.], 1996.

Orientador: Leonardo Goldstein Jr.
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica.

1. Pirólise – Simulação (Computadores). 2.
Gaseificadores – Simulação (Computadores) 3. Energia
da biomassa – Simulação (Computadores). I. Ushima,
Ademar Hakuo. II. Universidade Estadual de Campinas.
Faculdade de Engenharia Mecânica. III. Título.

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA TÉRMICA E FLUIDOS**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**Modelagem e Simulação de Pirólise e
Secagem de Biomassa em um Gaseificador de
Leito Movente Contracorrente**

Autor: **Ademar Hakuo Ushima**
Orientador: **Leonardo Goldstein Jr.**

Leonardo Goldstein Jr.

**Prof. Dr. Leonardo Goldstein Jr, Presidente
Universidade Estadual de Campinas**

Milton Mori

**Prof. Dr. Milton Mori
Universidade Estadual de Campinas**

Electo Eduardo Silva Lora

**Prof. Dr. Electo Eduardo Silva Lora
Universidade Estadual de Campinas**

Campinas, 21 de junho de 1996

SUMÁRIO

Volume II

ANEXO A : CÁLCULO DAS PROPRIEDADES FÍSICAS	1
A-1 POROSIDADE.	2
A-2 VOLUME ESPECÍFICO DOS POROS.	2
A-3 DIFUSIVIDADE DOS COMPONENTES GASOSOS.	3
A-4 CALOR ESPECÍFICO.	4
A-5 CONDUTIVIDADE TÉRMICA.	6
A-6 VISCOSIDADE DOS GASES.	8
ANEXO B : DETERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES DE PELÍCULA.	9
B-1 COEFICIENTE DE PELÍCULA DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR NA INTERFACE PARTÍCULA-GÁS.	10
B-2 COEFICIENTE DE PELÍCULA DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR NA INTERFACE ENTRE A PAREDE EXTERNA DO GASEIFICADOR E O MEIO AMBIENTE.	11
B-3 COEFICIENTE DE PELÍCULA DE TRANSPORTE DE MASSA NA INTERFACE ENTRE A SUPERFÍCIE DA PARTÍCULA E A FASE GASOSA.	12
ANEXO C : CÁLCULO DA PERDA DE CARGA NO LEITO.	14
ANEXO D : CÁLCULO DA ENTALPIA DE REAÇÃO.	16
ANEXO E : LISTAGEM DO PROGRAMA DE SIMULAÇÃO	18
E-1 PROGRAMA PRINCIPAL GLMOV.	19
E-2 SUBROTINA DE CÁLCULO DO DIÂMETRO DO LEITO.	32
E-3 SUBROTINA DE CÁLCULO DO CALOR ESPECÍFICO E ENTALPIA.	33
E-4 SUBROTINA DE CÁLCULO DOS COEFICIENTES ESTEQUIOMÉTRICOS DAS REAÇÕES QUÍMICAS.	34
E-5 SUBROTINA DE CONVERGÊNCIA CONV.	36
E-6 SUBROTINA DE CÁLCULO DA ENTALPIA DE COMBUSTÃO	36
E-7 SUBROTINA DE CÁLCULO DAS FRAÇÕES MOLARES.	38
E-8 SUBROTINA DE CÁLCULO DAS FRAÇÕES MOLARES.	39
E-9 SUBROTINA DE CÁLCULO DA TAXA DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR ENTRE A PAREDE EXTERNA DO GASEIFICADOR E O MEIO AMBIENTE.	39
E-10 FUNÇÃO DE CÁLCULO DO COEFICIENTE DE PELÍCULA DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR ENTRE A PAREDE EXTERNA DO GASEIFICADOR E O MEIO AMBIENTE.	41
E-11 SUBROTINA DE CÁLCULO DA VISCOSIDADE.	41
E-12 SUBROTINA DE CÁLCULO DA VELOCIDADE SUPERFICIAL DOS GASES.	42
E-13 SUBROTINA DE CÁLCULO DA CONDUTIVIDADE DE MISTURA DE GASES.	43
E-14 SUBROTINA DE CÁLCULO DO CALOR ESPECÍFICO DE MISTURA DE GASES.	44
E-15 SUBROTINA DE CÁLCULO DO CALOR ESPECÍFICO DA FASE SÓLIDA.	44
E-16 SUBROTINA DE CÁLCULO DAS CINÉTICAS DAS REAÇÕES QUÍMICAS.	45

E-17	SUBROTINA DE CÁLCULO DAS PROPRIEDADES FÍSICAS DA ÁGUA NAS FASES LÍQUIDA E VAPOR.	50
E-18	SUBROTINA DE CÁLCULO DA PRESSÃO DE VAPOR D'ÁGUA.	51
E-19	SUBROTINA DE CÁLCULO DA TEMPERATURA DE SATURAÇÃO D'ÁGUA.	52
E-20	SUBROTINA DE CÁLCULO DAS DIFERENCIAIS EM Z DAS DESCARGAS DE COMPONENTES E TEMPERATURAS.	54
E-21	FUNÇÃO DE CÁLCULO DO PARÂMETRO DE CONVERGÊNCIA DO PROGRAMA NAS REGIÕES DE COMBUSTÃO E GASEIFICAÇÃO.	58
E-22	FUNÇÃO DE CÁLCULO DO PARÂMETRO DE CONVERGÊNCIA NAS REGIÕES DE AQUECIMENTO, SECAGEM E PIRÓLISE.	64
E-23	SUBROTINA DE CÁLCULO DAS DESCARGAS DOS COMPONENTES DA MATÉRIA VOLÁTIL.	65
E-24	SUBROTINA DE LEITURA DE DADOS INICIAIS.	66
E-25	SUBROTINA DE INTEGRAÇÃO NAS REGIÕES DE AQUECIMENTO, SECAGEM E PIRÓLISE.	70
E-26	SUBROTINA DE CONVERGÊNCIA DA TEMPERATURA DA FASE SÓLIDA NA BASE DO GASEIFICADOR.	84
E-27	FUNÇÃO DE CÁLCULO DO PARÂMETRO DE CONVERGÊNCIA DA TEMPERATURA DA FASE SÓLIDA NA BASE DO GASEIFICADOR.	84

ANEXO A

CÁLCULO DAS PROPRIEDADES FÍSICAS

A1. POROSIDADE.

A porosidade do leito, ε_L , é calculada a partir das densidades do leito, ρ_L , e aparente da partícula, ρ_p . A primeira, também conhecida como densidade de empilhamento ou global, é obtida dividindo-se a massa de partículas pelo volume do recipiente que as contém. A segunda corresponde à densidade de uma partícula isolada.

A porosidade do leito é dada por :

$$\varepsilon_L = 1 - \frac{\rho_L}{\rho_p} \quad (A-1)$$

A porosidade da partícula, ε_p , é obtida a partir da densidade aparente da partícula, ρ_p , e da densidade real da partícula, ρ_r , que é a densidade da fase sólida da partícula sem os poros, determinada experimentalmente através de picnômetros de mercúrio. A porosidade da partícula é dada por :

$$\varepsilon_p = 1 - \frac{\rho_p}{\rho_r} \quad (A-2)$$

A porosidade do leito é empregada no cálculo dos coeficientes de película de calor e de massa, na interface sólido-gás. A porosidade da partícula, no cálculo da difusividade no interior de partículas.

A.2 VOLUME ESPECÍFICO DOS POROS.

O volume específico de poros, $\bar{V}$, nas partículas é dado por :

$$\bar{V} = \frac{1}{\rho_p} - \frac{1}{\rho_r} \quad (\text{A-3})$$

A porosidade das partículas, ε_p , pode ser escrita como :

$$\varepsilon_p = \rho_p \bar{V} \quad (\text{A-4})$$

A.3 DIFUSIVIDADE DOS COMPONENTES GASOSOS.

A difusividade de um gás em outro depende de uma série de fatores, como a concentração, a pressão, a temperatura e a natureza dos gases envolvidos. Segundo BIRD, STEWART e LIGHTFOOT (1960), em concentrações baixas, como as normalmente encontradas em gaseificadores operando com ar à pressão atmosférica, ela independe da concentração. Além disso, como os pesos moleculares dos componentes da fase gasosa são próximos entre si, adotou-se, para simplificação, uma difusividade média, válida para todos os componentes.

A difusividade média de um componente gasoso i através da camada limite existente em torno de uma partícula, $D_{f,i}$, é dada por FIELD (1967) como :

$$D_{f,i} = 8,677 \cdot 10^{-5} \frac{T_f^{1,75}}{P} \quad (\text{A-5})$$

onde : T_f = temperatura da camada limite, assumida como a média entre T_g e T_s e

P = pressão no gaseificador.

A difusividade efetiva de um componente gasoso i no interior de uma partícula, $D_{fn,i}$ é dada por WALKER (1959) pela relação :

$$D_{fn,i} = D_{f,i} \varepsilon_p^2 \quad (\text{A-6})$$

A.4 CALOR ESPECÍFICO.

- Para o cálculo do calor específico de um componente gasoso I, empregou-se a correlação de KARAPETYANTS (1976), dada por :

$$c_{p,i} = A_{1,i} + A_{2,i}T + \frac{A_{3,i}}{T^2} \quad (\text{A-7})$$

onde : $A_{k,i}$ = coeficientes polinomiais para o componente I

e

T = temperatura do meio gasoso.

Os coeficientes $A_{k,i}$ estão na listagem da subrotina de cálculo de calores específicos.

O limite de aplicabilidade desta correlação compreende temperaturas de 298 a 2500 K, suficiente para cobrir a faixa de variação de temperatura observada no gaseificador experimental. Para misturas, faz-se uma ponderação pela fração molar dos componentes gasosos, como proposto em PERRY e CHILTON (1973).

- O calor específico de fase sólida, na região de gaseificação e combustão, foi assumido como sendo igual à média dos calores específicos de carbono fixo e cinza, ponderada pelas respectivas frações mássicas. A correlação empregada para o cálculo do calor específico de carbono fixo também foi obtida de KARAPETYANTS (1978) :

$$c_{p,c} = 1,405 \cdot 10^3 + 3,974 \cdot 10^{-1} T_s - \frac{7,112 \cdot 10^7}{T_s^2} \quad (\text{A-8})$$

Para a cinza, que é assumida como composta exclusivamente de sílica, ele é dado por :

$$c_{p,cz} = 9,337 \cdot 10^2 + 2,568 \cdot 10^{-1} T_s - \frac{2,407 \cdot 10^7}{T_s^2} \quad (\text{A-9})$$

O calor específico da fase sólida fica :

$$c_{p,s} = \frac{(c_{p,c} w_{14} + c_{p,cz} w_{19})}{(w_{14} + w_{19})} \quad (A-10)$$

A faixa de validade destas equações é de 298 a 2500 K.

- Na região de pirólise, secagem e aquecimento, a fase sólida é considerada constituída por biomassa úmida, biomassa seca, tiço e carvão. Tiço corresponde à biomassa em fase intermediária de pirólise, com teor de matéria volátil entre o da biomassa seca e o do carbono fixo.

Os calores específicos da biomassa seca e do carbono fixo foram obtidos de ALVES e FIGUEIREDO (1989) e estão na Tabela A-1. Os calores específicos da biomassa úmida, $c_{p,mu}$, e do tiço, $c_{p,tc}$, foram obtidos ponderando-se os calores específicos dos materiais constituintes pelas suas frações mássicas.

$$c_{p,mu} = U_{bu} c_{p,H_2O} + (1 - U_{bu}) c_{p,ms} \quad (A-11)$$

onde : $c_{p,ms}$ = calor específico de madeira seca,

c_{p,H_2O} = calor específico de água líquida e

U_{bu} = umidade, base úmida.

$$c_{p,tc} = a_{vol} c_{p,c} + (1 - a_{vol}) c_{p,ms} \quad (A-12)$$

onde : $c_{p,c}$ = calor específico de carvão.

e

a_{vol} = fração de matéria volátil pirolisada.

Tabela A-1 Calores específicos adotados na região de pirólise, secagem e aquecimento.

Material	Calor Específico (KJ.kg⁻¹.K⁻¹)
madeira seca e matéria volátil	2500
carbono fixo	1350
água líquida	4186
produto gasoso de pirólise	1200

O calor específico da matéria volátil, neste modelo, foi considerado igual ao da madeira seca, já que representa 70% de sua composição em massa.

Os calores específicos da Tabela A-1 foram considerados constantes nas regiões de pirólise, secagem e aquecimento para reduzir o tempo de integração. O que se justifica porque a variação de temperatura, nesta região, é pouco intensa e os erros introduzidos pela variação dos calores específicos são de segunda ordem.

A.5 CONDUTIVIDADE TÉRMICA.

- A condutividade térmica de um componente gasoso i foi obtida de YAWS et alii (1976) :

$$K_i = B_{1,i} + B_{2,i} T + B_{3,i} T^2 + B_{4,i} T^3 \quad (A-13)$$

Os coeficientes polinomiais $B_{k,i}$ empregados estão na listagem da subrotina de cálculo das condutividades.

No caso de misturas de gases, a ponderação adotada foi a de SOUZA SANTOS (1985) :

$$K_g = \frac{\sum_{i=1}^{13} K_i y_i M_i^{1/3}}{\sum_{i=1}^{13} y_i M_i^{1/3}} \quad (\text{A-14})$$

A faixa de validade desta correlação é de 298 a 1700 K. No caso da ultrapassagem do limite superior, a temperatura de cálculo da condutividade foi fixada em 1700 K, evitando a obtenção de valores sem significado físico. O erro introduzido é pequeno uma vez que a temperatura da fase gasosa ultrapassa a faixa estabelecida somente numa região muito estreita do gaseificador, geralmente na região de combustão.

- A condutividade térmica da fase sólida, na região de gaseificação e combustão, foi considerada igual ao valor obtido experimentalmente para carvão vegetal por BROWN (1972). O valor encontrado, de 0,22 W/(m.K), é muito superior aos valores normalmente encontrados na literatura e foi determinado a quente, sem passar por um processo de resfriamento, evitando a formação de trincas ao longo da matriz.
- A condutividade da fase sólida, na região de pirólise, secagem e aquecimento, foi obtida de forma semelhante à empregada no cálculo do calor específico. As correlações, obtidas de ALVES e FIGUEIREDO (1989), são :

$$K_{mu} = K_{ms} + K_{H_2O} U_{bs} \quad (\text{A-15})$$

onde : K_{mu} = condutividade térmica de madeira úmida,

K_{ms} = condutividade de madeira seca e

U_{bs} = umidade, base seca.

$$K_{tc} = a_{vol} K_c + (1 - a_{vol}) K_{ms} \quad (\text{A-16})$$

onde : K_{tc} = condutividade térmica do tiço e

K_c = condutividade térmica de carbono fixo.

As condutividades térmicas dos componentes da madeira são apresentadas na Tabela A-2.

Tabela A-2 Condutividade térmica dos constituintes da madeira.

Componente	Condutividade térmica (W.m⁻¹K⁻¹)
Madeira seca	0,166
Carbono fixo	0,221
Água líquida	0,386

A.6 VISCOSIDADE DOS GASES.

No cálculo da viscosidade dos gases empregou-se a correlação retirada de YAWS et alii (1976) :

$$\mu_i = C_{1,i} + C_{2,i}T + C_{3,i}T^2 \quad (\text{A-17})$$

Os coeficientes polinomiais desta equação estão na listagem da subrotina de cálculo das viscosidades. Para misturas a ponderação empregada é dada por :

$$\mu_g = \frac{\sum_{i=1}^{13} y_i \mu_i M_i^{1/2}}{\sum_{i=1}^{13} y_i M_i^{1/2}} \quad (\text{A-18})$$

conforme sugerido em BIRD, R.B., STEWART, W.E., LIGHTFOOT, E.N. (1960).

ANEXO B

DETERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES DE PELÍCULA.

Os coeficientes de película empregados nos balanços de massa e energia do Capítulo 3 são apresentados a seguir.

B-1 COEFICIENTE DE PELÍCULA DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR NA INTERFACE PARTÍCULA-GÁS.

O coeficiente de película de transferência de calor entre a fase sólida e gasosa, em um leito fixo, foi obtido a partir do número de Nusselt, de acordo com BIRD, STEWART e LIGHTFOOT (1960).:

$$h = \frac{N_{Nu} K_g}{D_p} \quad (B-1)$$

O número de Nusselt é dado por :

$$N_{Nu} = 2m_1(1-\varepsilon_L)\psi^2 N_{Re}^{m_2} N_{Pr}^{1/3} \quad (B-2)$$

$$\text{onde : } N_{Re} = \frac{F_g}{\frac{A_{Ts}}{y_p} \mu_g \psi},$$

$m_1=0,91$ e $m_2=0,49$ para $N_{Re}<50$,

$m_1=0,61$ e $m_2=0,59$ para $N_{Re}>50$ e

$\psi = 0,86$ para partículas planas.

Na região de pirólise e secagem, onde o fluxo em massa de gases que atravessa a superfície da partícula atinge valores significativos, aplicou-se um fator de correção ao coeficiente de película de transferência de calor, como apresentado em BIRD, STEWART e LIGHTFOOT (1960). A relação entre os coeficientes de transferência de calor, com e sem correção, é dado por :

$$\phi = \frac{h^*}{h} \quad (\text{B-3})$$

onde : ϕ = fator de correção do coeficiente de película e

h^* = coeficiente de película corrigido.

Esta relação é função do fluxo mássico de gases e do seu calor específico e pode ser estimada a partir da equação :

$$\phi = \frac{\phi}{e^{\phi} - 1} \quad (\text{B-4})$$

onde $\phi = \frac{W_g c_{pg}}{h}$, indica a relação do fluxo de calor transportado pelo fluxo de massa que atravessa a superfície do cavaco com o fluxo de calor trocado por convecção entre o cavaco e a fase gasosa.

B-2 COEFICIENTE DE PELÍCULA DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR NA INTERFACE ENTRE A PAREDE EXTERNA DO GASEIFICADOR E O MEIO AMBIENTE.

Este coeficiente é utilizado no cálculo de fluxo de calor perdido pelas paredes externas do gaseificador. A correlação empregada foi a de HUGHES e DEMAGA (1974).

$$h_{pe} = 1,9468(T_{pe} - T_a)^{1/4} (2,8633v_a + 1)^{1/2} + 5,75\varepsilon_{pe} \frac{\left[\left(\frac{T_{pe}}{100} \right)^4 - \left(\frac{T_a}{100} \right)^4 \right]}{(T_{pe} - T_a)} \quad (\text{B-5})$$

onde : T_{pe} = temperatura da parede externa,

T_a = temperatura do meio ambiente,

v_a = velocidade do ar no lado externo do gaseificador e

ε_{pe} = emissividade da parede externa do gaseificador.

A temperatura da parede externa é obtida por reiteração no balanço energético da fase gasosa, como explicado no Capítulo 3.

B-3 COEFICIENTE DE PELÍCULA DE TRANSPORTE DE MASSA NA INTERFACE ENTRE A SUPERFÍCIE DA PARTÍCULA E A FASE GASOSA.

O coeficiente de película utilizado na modelagem da reação heterogênea, no Capítulo 4, foi obtida de GUPTA e THODOS (1963) :

$$K_{TM,i} = N_{Sh,i} D_{f,i} \frac{\rho_{g,f}}{M_g D_p} \quad (B-6)$$

onde : $N_{Sh,i}$ = número de Sherwood,

$\rho_{g,f}$ = densidade do gás na película e

M_g = massa molecular média do gás.

Os números adimensionais são dados pelas relações :

$$N_{Sh,i} = 2,06 N_{Re}^{0,425} \frac{N_{Sc,i}^{1/3}}{\varepsilon_L} \quad (B-7)$$

$$N_{Re} = \frac{v_{g,f} D_p \rho_{g,f}}{\mu_{g,f}} \quad (B-8)$$

$$N_{Sc,i} = \left(\frac{\mu_g}{\rho_g D_{f,i}} \right)_f \quad (B-9)$$

onde : $v_{g,f}$ = velocidade do gás e

$\mu_{g,f}$ = viscosidade do gás na temperatura de película.

A velocidade do gás é dada por :

$$v_{g,f} = \frac{F_g}{A_T \rho_{g,f}} \quad (\text{B-10})$$

ANEXO C

CÁLCULO DA PERDA DE CARGA NO LEITO.

Apesar do gaseificador ser considerado isobárico, há uma pequena queda de pressão ao longo do gaseificador. É importante ter uma idéia da ordem de grandeza desta queda de pressão quando do dimensionamento dos selos d'água, ventiladores e sistemas de limpeza do gaseificador. Ao fim da simulação utilizou-se uma correlação de IDEL'CIK (1960), que estima a perda de carga no leito, com base na hipótese de uma distribuição linear de temperatura ao longo do leito. Esta perda de carga (ΔP_L) foi calculada a partir da relação :

$$\Delta P_L = \zeta \frac{\gamma_{g,m} v_{g,m}^2}{2g} \quad (C-1)$$

onde : $\gamma_{g,m}$ = peso específico médio da fase gasosa e

$v_{g,m}$ = velocidade média da fase gasosa.

com :

$$\zeta = \frac{1,53}{\epsilon_L^{4,2}} \lambda \frac{Z_L}{D_{p,m}} + 2 \frac{T_{g,T} + T_{g,B}}{T_{g,m}} \quad (C-2)$$

onde : $D_{p,m}$ = diâmetro médio de partículas no leito,

$T_{g,T}$ = temperatura da fase gasosa no topo do leito,

$T_{g,B}$ = temperatura da fase gasosa na base do leito,

$T_{g,m}$ = temperatura média da fase gasosa,

$$\lambda = \frac{75}{Re} + \frac{15}{\sqrt{Re}} + 1,$$

$$Re = \frac{0,45}{(1 - \epsilon_L) \sqrt{\epsilon_L}} \frac{v_{g,m} D_{p,m}}{\mu_{g,m}},$$

$\mu_{g,m}$ = viscosidade da fase gasosa calculada a $T_{g,m}$.

ANEXO D

CÁLCULO DA ENTALPIA DE REAÇÃO.

As entalpias de reação utilizadas nos balanços de energia do Capítulo 3, com exceção da reação de pirólise, foram calculadas a partir das entalpias de formação dos reagentes e produtos formados, referidas a 298 K, e dos coeficientes estequiométricos. As entalpias de formação adotadas estão na listagem da subrotina de cálculo das entalpias de formação.

$$H_j = \sum_{i=\text{reagentes}} v_{ij} H_i - \sum_{i=\text{produtos}} v_{ij} H_i \quad (\text{D-1})$$

A entalpia da reação de pirólise de madeira, reação (R-5), foi obtida a partir de dados experimentais de HAVENS (1972) onde ela é considerada endotérmica e igual a $1,9874 \cdot 10^5 \text{ J.kg}^{-1}$. Este valor representa apenas cerca de 1,0 % da entalpia de combustão de madeira, o que está próximo de valores encontrados na literatura.

ANEXO E

LISTAGEM DO PROGRAMA DE SIMULAÇÃO

E-1 PROGRAMA PRINCIPAL GLMOV.

```

PROGRAM GLMOV
C
C INCORPORACAO TRANSFERENCIA DE CALOR NA DIRECAO Z POR RADIACAO
C E NOVA ROTINA DE PIROLISE, SECAGEM E AQUECIMENTO
C
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
REAL KIS
EXTERNAL DCONV,DTCRS
DIMENSION VMUMID(1000),UMBU(1000)
DIMENSION XCASO(50),YCASO(50, 5)
DIMENSION DTEXP(1000),DQEX(1000),DQEXT(1000),Y1(1000)
DIMENSION YX4(1000,10),AYX(1000,12)
DIMENSION YX(1000,19),CS(1000,24)
DIMENSION YX6(1000,7),YT(1000,20)
DIMENSION FRI(21),XGRI(21),WGRI(21),FRS(21),FRE(21)
DIMENSION XGRS(13),WGRS(13),XGRE(13)
DIMENSION DF(23)
DIMENSION XPSMT(19),HG(19)
DIMENSION H(19),CP(19),AICPRS(19),HRS(19),CPRS(19)
DIMENSION AARMAT(5)
DIMENSION XPGFRS(13),XPGSRS(13),XGSRS(13),WGSRS(13)
COMMON/CCCC01/DTEXP,DQEX,DQEXT,YX4,YX6,YX,YT,Y1,CS,AYX
COMMON/CCCC02/DF,FRS,FRI,FRE,WGRS,WGRI,XGRS,XGRI,XGRE
COMMON/CCCC03/FNAR,FNVP,XN2CB,QNSEN,HVH2O,AMGRS,AMGRI,AMGRE
COMMON/CCCC04/CPGRS,CPGRI,CPGRE,TGRS,TGRI,TGRE,TGCRS,TGCRI,TGCRE
COMMON/CCCC05/FNGRS,FNGRI,FNGRE,FMGRS,FMGRI,FMGRE,FMRZ
COMMON/CCCC06/J,TENTG,QEXT,TSMAX,ZTSMAX,JTMAX,FMHIE,FRZ(21)
COMMON/DD/H,CP
COMMON/DDDD/AICP(19),CPG,AICPTS(19),AICPTG(19)
COMMON/CRRRRR/CR(19,14)
COMMON/VVVVVV/FMTV,FNTV,AV(13),DEV(18),FNV(13),FMV(13),XV,WV
COMMON/VVVVVV1/YV(13)
COMMON/ALCATR/ALC(18)
COMMON/FF/F(23)
COMMON/BD/AMW(19)
COMMON/DAD/UMIDAD,VOLAT,CARFIX,CINZAS,PCSMT,FMMT,ARMT,VPMT,
1TMT,TAR,TVP,POPER,DL,ZL,DIAMPT,ITIPO,IFORM,MODELQ,XO2CB,DLZ(10)
COMMON/DAD2/WC,WH,WO,WN,WS,WZ
COMMON/DAD1/WCBS,WHBS,WOBS,WNBS,WSBS,WZBS
COMMON/OUT/FMAR,FMVP
COMMON/ABC/HF298(13)
COMMON/CIM/IMPRI
COMMON/FRRECC/IREC,ZRS,FATRS,ZRI,FATRI,ZREE
COMMON/QQ/TEXT,VV,EPS,XIS,KIS
COMMON/SSS/Y(19),WG(13),AMMG,FNG,FMS
COMMON/RRR/ROMAT,ROCINZ,VPORM,EL,EP,ROGB,ROREAL,JAFCMC,
* VPORZ,X0CFX,X0VOL
COMMON/QQQCAM/HCAM,EANU,ESCHG,CTCHG,EMISPI,FMAC,TETAC,PRECAM
COMMON/SECCCC/TASEC,ZASEC,JAPPS,HVSEC
COMMON/GEOCAM/DIANU,DEANU,ATANU,DEQANU
COMMON/PARRR3/HR(18)
COMMON/PARRR4/AREA,TS,TG,PID,FQEX,HTPERD,AEXDZ,QEX,TSH2O,TASECG
*,AREAZ0,AREAZL
COMMON/PARRR5/PI,R,CPS,DP,ROP,DZ,P,HGG,HSS,HTCSG,HTMSG,TEXP,TEBAC
COMMON/PARRR6/HG,HTMGS

```

```

COMMON/PARRR7/C,HI,O,AN,S,CINZ,CETM,HIETM,OETM,ANETM,SETM,ZETM,XC
*,UMIETM,FAUXDP,ZLEITO
COMMON/PARRR8/DFDZ(23)
COMMON/RCINNN/RRN(14)
COMMON/CCCAM/TAC,TPIG,QCAMZ,FQCAMZ,IEB,HISOL
COMMON/FRTCZ1/TMAXPS,TMINPS
COMMON/VINI/EMS,FCRAD
COMMON/DTSDZ/DTSI,IZ,IY
COMMON/PRINT/JJJ,JFGAS
COMMON/PIRO1/ZP,TGP,TDP,TGF
COMMON/PIRO4/PMGRS
COMMON/ZPIR/Z,TGFGAS
COMMON/UMIDO/VMUMID,UMBU
OPEN(5,FILE='DATA.DAT',FORM='FORMATTED',MODE='READ')
OPEN(6,FILE='GLMOV.RES',FORM='FORMATTED')
DATA PI,R,G/3.141592,8314.2,9.80665/
DATA AMW /28.01,44.01,28.02,2.01,16.04,30.07,34.08,32.00,18.02
*,17.03,30.01,64.06,180.16,12.01,1.01,16.00,14.01,32.06,60.06/
DATA HF298/-110.599E+06,-393.777E+06,0.0,0.0,-74.860E+06,
* -84.783E+06,-20.934E+06,0.0,-241.980E+06,-46.222E+06,90.309E+06,
* -297.095E+06,-1010.22E+06/
DATA CR/19*0.0,
2 19*0.0,
3 -1.,1.,0.,1.,4*0.0,-1.,10*0.0,
4 -2.,2.,5*0.0,-1.,11*0.0,
5 3*0.0,-2.,3*0.0,-1.,2.,10*0.0,
6 2.,-1.,11*0.0,-1.,5*0.0,
7 3*0.0,-2.,1.,8*0.0,-1.,5*0.0,
8 0.,1.,2*0.0,-1.,2*0.0,-2.,2.,10*0.0,
9 0.,4.,3*0.0,-2.,0.,-7.,6.,10*0.0,
D 7*0.0,-5.,6.,-4.,4.,8*0.0,
1 6*0.0,-2.,-3.,2.,2*0.0,2.,7*0.0,
2 19*0.0,
3 19*0.0,
4 8*0.0,1.,5*0.0,-2.,-1.,3*0.0/
C
C  SIMBOLOGIA
C
C  F=DESCARGA QUALQUER
C  FM=DESCARGA MASSICA                (KG/S)
C  FN=DESCARGA MOLAR                  (KMOL/S)
C  FV=DESCARGA VOLUMETRICA            (M3/S)
C  GM=FLUXO DE MASSA                  (KG/M2/S)
C  GN=FLUXO MOLAR                     (KMOL/M2/S)
C  GV=FLUXO VOLUMETRICO OU VELOCIDADE (M/S)
C  U=VELOCIDADE                       (M/S)
C  P=PRESSAO                          (PA)
C  T=TEMPERATURA                      (K)
C  PT=POTENCIA                        (W)
C  EF=EFICIENCIA
C  RD=RENDIMENTO                      (%)
C
C  INDICES SUPLEMENTARES
C
C  G=RELATIVO AO GAS
C  S=RELATIVO AO SOLIDO
C  V=RELATIVO A VOLATEIS
C  GL=RELATIVO A GAS LIMPO(ISENTO DE ALCATRAO POREM UMIDO)
C  GS=RELATIVO A GAS SECO(POREM COM ALCATRAO)

```

```

C  GQ      =RELATIVO A GAS A TEMPERATURA DE SAIDA DO GASEIFICADOR E
C           CONTENDO AGUA E ALCATRAO
C  GF      =RELATIVO A GAS A 298K ISENTO DE ALCATRAO E AGUA
C
C  QUANTO AOS INDICES DAS DIVERSAS RETIRADAS E ENTRADAS POSSIVEIS
C
C  RS      =RELATIVO A RETIRADA SUPERIOR
C  RI      =RELATIVO A RETIRADA INFERIOR OU INTERMEDIARIA
C  RE      =RELATIVO A RECICLO
C  RZ      =RELATIVO A RESIDUO SOLIDO
C
C  1=CO,2=CO2,3=N2,4=H2,5=CH4,6=C2H6,7=H2S,8=O2,9=H2O,10=NH3,11=NO
C  12=SO2,13=ALCATRAO,14=C,15=H,16=O,17=N,18=S,19=CINZA,20=TS,21=TG
C  22=UMIDADE,23=DTSDZ
C
C  DESCARGAS (F(I)) PARA GASES EM KMOL/S E PARA SOLIDOS EM KG/S
C  TEMPERATURAS EM K
C  ENTRADAS E SAIDAS EM UNIDADES DO SISTEMA INTERNACIONAL
C  CALCULOS NO S.I.
C
C
C  REACAO 1      C + O2      =      CO + CO2
C  REACAO 2      C + H2O     =      CO + H2
C  REACAO 3      CO + H2O    =      CO2 + H2
C  REACAO 4      2 CO + O2   =      2 CO2
C  REACAO 5      2 H2 + O2   =      2 H2O
C  REACAO 6      CO2 + C     =      2 CO
C  REACAO 7      C + 2 H2    =      CH4
C  REACAO 8      CH4 + 2 O2   =      CO2 + 2 H2O
C  REACAO 9      2 C2H6 + 7 O2 =      4 CO2 + 6 H2O
C  REACAO 10     4 NH3 + 5 O2 =      4 NO + 6 H2O
C  REACAO 11     2 H2S + 3 O2 =      2 SO2 + 2 H2O
C  REACAO 12     MAT. VOLATIL.=      AV(1) CO +AV(2) CO2 +..+ AV(13) ALCATRAO(G)
C  REACAO 14     MAT. UMIDO  =      H2O + MATERIAL SECO
C
C  READ(5,*)NCASOS
C  DO 4000 ICASOS=1,NCASOS
C  IF(ICASOS.EQ.1) GO TO 4003
C  DO 4002 LIMP=1,50
C  XCASO(LIMP)=0.
C  DO 4002 JIMP=1,5
C  4002 YCASO(LIMP,JIMP)=0.
C  4003 CONTINUE
C  READ(5,*) IOTIMZ,FMULAR,MINARM,MAXARM,IPASAR,FMULVP,MINVPM,MAXVPM,
C  * IPASVP,IMPRI
C
C  NO CASO DE PROCURAR PONTO OTIMO NAO COLOCAR MAIS QUE
C  CINCO (5) PONTOS PARA RELACAO AR/MATERIAL
C
C  CALL DADOS
C
C  WRITE(6,9999)
C  DO 3002 IVAPM=MINVPM,MAXVPM,IPASVP
C  DO 3001 IARM=MINARM,MAXARM,IPASAR
C
C  IF(ICASOS.EQ.1) GO TO 4004
C
C  'LIMPA' VALORES ESTOCADOS PARA PLOTAGEM DE GRAFICOS
C

```

```

DO 4001 LIMP=1,1000
VMUMID(LIMP)=0.
UMBU(LIMP)=0.
DTEXP(LIMP)=0.
DQEX(LIMP)=0.
DQEXT(LIMP)=0.
Y1(LIMP)=0.0
DO 4011 KIMP=1,19
4011 YX(LIMP,KIMP)=0.
DO 4021 IIMP=1,24
4021 CS(LIMP,IIMP)=0.
DO 4031 IIMP=1,7
4031 YX6(LIMP,IIMP)=0.
DO 4041 IIMP=1,12
4041 AYX(LIMP,IIMP)=0.
DO 4051 IIMP=1,10
4051 YX4(LIMP,IIMP)=0.
DO 4061 IIMP=1,20
4061 YT(LIMP,IIMP)=0.
4001 CONTINUE
DO 104 K=1,13
FRS(K)=0.
AICPRS(K)=0.
104 CONTINUE
DO 105 K=1,18
DEV(K)=0.
105 CONTINUE
4004 CONTINUE
IF(IOTIMZ.NE.1) GO TO 3004
VPMT=FLOAT(IVAPM)*FMULVP
ARMT=FLOAT(IARM)*FMULAR
FMAR=FMMT*ARMT
FMVP=FMMT*VPMT
3004 CONTINUE
C
IF(IOTIMZ.EQ.1) WRITE(6,9999)
C
XN2CB=1.-XO2CB
FNAR=FMAR/(AMW(8)*XO2CB+AMW(3)*XN2CB)
FNVP=FMVP/AMW(9)
WO2CB=XO2CB*AMW(8)/(XO2CB*AMW(8)+XN2CB*AMW(3))
RO2CF=FMAR*WO2CB/(FMMT*CAREFIX/100.)
RVAPCF=FMVP/(FMMT*CAREFIX/100.)
C
C  CALCULOS PRELIMINARES
C
P=POPER
CALL TBAGUA(P,TSH2O,HVSEC)
TASECG=TSH2O+100.
FMMTS=FMMT*(1.-UMIDAD/100.)
CETM=FMMTS*WCBS
HIETM=FMMTS*WHBS
OETM=FMMTS*WOBS
ANETM=FMMTS*WNBS
SETM=FMMTS*WSBS
ZETM=FMMTS*WZBS
UMIETM=FMMT-FMMTS
FNUMI=UMIETM/AMW(9)
FMHIE=HIETM+(FNUMI+FNVP)*2.*AMW(15)

```

```

C
C  DETERMINACAO DA COMPOSICAO DE MATERIA VOLATIL
C
C  CALL VOLATI
C
C  DETERMINACAO DE VAZAO DE COMPONENTES FASE SOLIDA
C
C=CETM-DEV(14)
HI=HIETM-DEV(15)
O=OETM-DEV(16)
AN=ANETM-DEV(17)
S=SETM-DEV(18)
CINZ=ZETM
IF(C.LT.0.) C=0.
IF(HI.LT.0.) HI=0.
IF(O.LT.0.) O=0.
IF(AN.LT.0.) AN=0.
IF(S.LT.0.) S=0.
C
C  WRITE (6,901) CETM,HIETM,OETM,ANETM,SETM,ZETM,UMIETM
901 FORMAT(/,2X,'CETM= ',E12.5,3X,'HIETM=',E12.5,2X,'OETM=',E12.5,/,
* 2X,'ANETM= ',E12.5,2X,'SETM= ',E12.5,2X,'ZETM=',E12.5,/,2X,
* 'UMIETM=',E12.5,/)
C
C  WRITE(6,902)
902 FORMAT( 2X,'FNV:',/)
WRITE(6,5007) FNV
C
C  WRITE(6,903)
903 FORMAT( 2X,'FMV:',/)
WRITE(6,5007) FMV
C
C  WRITE(6,904) C,HI,O,AN,S,CINZ,XV,WV,FNTV,FMTV
904 FORMAT(2X,'C =',E12.5,2X,'HI=',E12.5,2X,'O= ',E12.5,/,2X,'AN=',
1 E12.5,2X,'S= ',E12.5,2X,'CINZ=',E12.5,/,2X,'XV=',E12.5,2X,'WV=',
2 E12.5,2X,'FNTV=',E12.5,2X,'FMTV=',E12.5,/)
C
C  WRITE (6,905)
905 FORMAT( 2X,'ALC(14)...ALC(18):',/)
WRITE (6,900) (ALC(J),J=14,18)
900 FORMAT(3E12.5,/,2E12.4,/)
C
C  WRITE(6,906)
906 FORMAT( 2X,'DEV(14)...DEV(18):',/)
WRITE(6,900) (DEV(J),J=14,18)
C
C  WRITE(6,907)
907 FORMAT( 2X,'AMW(1)...AMW(19):',/)
WRITE(6,908) AMW
908 FORMAT(2X,4E12.5,/,2X,4E12.5,/,2X,4E12.5,/,2X,4E12.5,/,2X,3E12.5,
1 //)
C
C  WRITE(6,909) FNAR,FMMT,FNVP,RO2CF,RVAPCF,TSH2O,TASECG
909 FORMAT(2X,'FNAR= ',E12.5,2X,'FMMT= ',E12.5,2X,'FNVP= ',E12.5,/,
1 2X,'RO2CF= ',E12.5,2X,'RVAPCF=',E12.5,2X,'TSH2O=',E12.5,/,2X,
2 'TASECG=',E12.5,/)
C
C  WRITE(6,910)
910 FORMAT( 1X,'AV(1)...AV(13):',/)

```

[illegible]

```
C
C $$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$
C FIM TRECHO DE PIROLISE, SECAGEM E AQUECIMENTO
C $$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$
C
C J=JJJ
C
C
C CALCULOS FINAIS,IMPRESSAO DE RESULTADOS E TERMINO
C
C DUMID=FRS(9)
C SUM1=0.0
C SUM1=FNGRS-FRS(9)
C CALL ENTCOM(WGRS,HCGRS,HGGLRS,PCGRS,PCGLRS)
C FRS(9)=0.0
C
C DO 34 JK=1,13
C XGSRS(JK)=FRS(JK)/SUM1
C XPGSRS(JK)=XGSRS(JK)*100.
34 CONTINUE
C DO 100 JK=1,12
C XPGFRS(JK)=XPGSRS(JK)/(1.-XGSRS(13))
100 CONTINUE
C FRS(9)=DUMID
C CALL XPARAW(XGSRS,WGRS,AMGSRS)
C DO 36 K=14,19
C 36 XPSMT(K)=Y(K)*100.
C PHPERD=(-QEXT/(FMMTS*PCSMT))*100.
C SEGRS=0.0
C DO 52 M=1,13
C CALL CPH(M,TGRS,CPRS(M),HRS(M),AICPRS(M))
C SEGRS=SEGRS+AICPRS(M)*FRS(M)
52 CONTINUE
C HNGRS=SEGRS/FNGRS
C WRITE(6,545)TGRS,HNGRS
545 FORMAT(/,'TEMP. GAS NO TOPO (GC)=' ,E12.5/,
1 'ENTALPIA SENSIVEL MOLAR GAS TOPO(J/KMOL)=' ,E12.5)
IF(IOTIMZ.EQ.1) GO TO 3006
C
C WRITE(6,2007)
2007 FORMAT(1H1,//,' ALTURA , CALOR PERD., PERDA ACUMUL. , TEMPER.
* EXT. ',/, '(M)', '(W)', '(W)', '(GC)'
*,//)
C
C DO 601 JK=1,J
C AZ=Y1(JK)*ZL
C WRITE(6,701)AZ,DQEX(JK),DQEXT(JK),DTEXP(JK)
701 FORMAT(E12.5,',',E12.5,',',E12.5,',',E12.5)
601 CONTINUE
C
C WRITE(6,1013)
1013 FORMAT(1H1,//, ' PERFIS DAS VAZOES DE COMPONENTES NO GAS (KMOL
1/S) E NO SOLIDO (KG/S)',//,
*' ALTURA(M)', ' CO, ' CO2, ' N2, ' H2, ' CH4 ',
*/,/)
C
C DO 63 JK=1,J
C AZ=Y1(JK)*ZL
C DO 9063 M=1,19
```

```

      IF(CS(JK,M).LT.1.E-99) CS(JK,M)=0.
9063 CONTINUE
      WRITE(6,604) AZ,(CS(JK,M),M=1,5)
63 CONTINUE
604 FORMAT(E10.5,' ',E10.5,' ',E10.5,' ',E10.5,' ',E10.5,' ',E10.5)
      WRITE(6,1023)
1023 FORMAT(1H1,/, ' PERFIS DAS VAZOES DE COMPONENTES NO GAS (KMOL
1/S) E NO SOLIDO (KG/S)',/,
* ALTURA(M), ' ' C2H6, ' ' H2S, ' ' O2, ' ' H2O ' ,/)
C
      DO 163 JK=1,J
      AZ=Y1(JK)*ZL
      WRITE(6,604) AZ,(CS(JK,M),M=6,9)
163 CONTINUE
C
      WRITE(6,1014)
1014 FORMAT(1H1,/, ' PERFIS DAS VAZOES DE COMPONENTES NO GAS (KMOL
1/S) E NO SOLIDO (KG/S)',/, 'ALTURA(M)',
* NH3, ' ' NO, ' ' SO2, ' ' ALCATRAO, '
* C, ')
C
      DO 164 JK=1,J
      AZ=Y1(JK)*ZL
      WRITE(6,604) AZ,(CS(JK,M),M=10,14)
164 CONTINUE
      WRITE(6,1114)
1114 FORMAT(1H1,/, ' PERFIS DAS VAZOES DE COMPONENTES NO GAS (KMOL
1/S) E NO SOLIDO (KG/S)',/, 'ALTURA(M)',
* H, ' ' O, ' ' N, ' ' S, '
* CINZA, ')
C
      DO 264 JK=1,J
      AZ=Y1(JK)*ZL
      WRITE(6,604) AZ,(CS(JK,M),M=15,19)
264 CONTINUE
C
      WRITE(6,2023)
2023 FORMAT(1H1,/, ' PERFIS DAS FRACOES MOLARES P/GASES E MASSICAS
1P/ SOLIDOS NO LEITO ',/,
* ALTURA(M), ' ' CO, ' ' CO2, ' ' N2, '
* H2, ' ' CH4 ' ,/)
C
      DO 65 JK=1,J
      AZ=Y1(JK)*ZL
      DO 9065 M=1,19
      IF (YX(JK,M).LT.1.E-99) YX(JK,M)=0.
9065 CONTINUE
      WRITE(6,604) AZ,(YX(JK,M),M=1,5)
65 CONTINUE
      WRITE(6,2323)
2323 FORMAT(1H1,/, ' PERFIS DAS FRACOES MOLARES P/GASES E MASSICAS
1P/ SOLIDOS NO LEITO ',/,
* ALTURA(M), ' ' C2H6, ' ' H2S, '
* O2, ' ' H2O ' ' NH3, ' ,/)
C
      DO 165 JK=1,J
      AZ=Y1(JK)*ZL
      WRITE(6,604) AZ,(YX(JK,M),M=6,10)
165 CONTINUE

```

```

C
  WRITE(6,2024)
2024 FORMAT(1H1,/,/, ' PERFIS DAS FRACOES MOLARES P/GASES E MASSICAS
  1P/SOLIDOS NO LEITO ',/, ' ALTURA(M)', '
  * NO, ' ', SO2, ' ', ALCATRAO, ' ',
  * C, ' ', H, ' ',/)
C
  DO 66 JK=1,J
  AZ=Y1(JK)*ZL
  WRITE(6,604) AZ,(YX(JK,M),M=11,15)
66 CONTINUE
  WRITE(6,2124)
2124 FORMAT(1H1,/,/, ' PERFIS DAS FRACOES MOLARES P/GASES E MASSICAS
  1P/SOLIDOS NO LEITO ',/, ' ALTURA(M)', '
  * O, ' ', N, ' ', S, ' ',
  * CINZA, ' ',/)
C
  DO 166 JK=1,J
  AZ=Y1(JK)*ZL
  WRITE(6,604) AZ,(YX(JK,M),M=16,19)
166 CONTINUE
C
  WRITE(6,2025)
2025 FORMAT(1H1,/,/, ' PERFIS DAS FRACOES MOLARES P/GASES (BASE SECA
  1 E LIVRE DE ALCATRAO) ',/,
  * ALTURA(M), ' ', CO, ' ', CO2, ' ', N2, ' ',
  * H2, ' ', CH4, ' ',/)
C
  DO 2027 JK=1,J
  AZ=Y1(JK)*ZL
  DO 9027 M=1,12
  IF(AYX(JK,M).LT.1.E-99) AYX(JK,M)=0.
9027 CONTINUE
  WRITE(6,604) AZ,(AYX(JK,M),M=1,5)
2027 CONTINUE
  WRITE(6,2125)
2125 FORMAT(1H1,/,/, ' PERFIS DAS FRACOES MOLARES P/GASES (BASE SECA
  1 E LIVRE DE ALCATRAO) ',/,
  * ALTURA(M), ' ', C2H6, ' ', H2S, ' ', O2, ' ',
  */)
C
  DO 2127 JK=1,J
  AZ=Y1(JK)*ZL
  WRITE(6,604) AZ,(AYX(JK,M),M=6,8)
2127 CONTINUE
C
  WRITE(6,2126)
2126 FORMAT(1H1,/,/, ' PERFIS DAS FRACOES MOLARES P/GASES (BASE SECA
  1 E LIVRE DE ALCATRAO) ',/,
  * NH3, ' ', NO, ' ', SO2, ' ',/)
C
  DO 2227 JK=1,J
  AZ=Y1(JK)*ZL
  WRITE(6,605) AZ,(AYX(JK,M),M=10,12)
2227 CONTINUE
605 FORMAT(E10.5,',',E10.5,',',E10.5,',',E10.5,',',E10.5)
C
  WRITE(6,3130)
3130 FORMAT(/,/, ' PERFIS DAS CINETICAS DAS REACOES (KMOL/M2.S)',/,

```

```

1' ALTURA R1 R2 R3 R4 R5 ',//)
DO 3150 JK=1,J
AZ=Y1(JK)*ZL
WRITE(6,3140) AZ,(YX4(JK,M),M=1,5)
3150 CONTINUE
3140 FORMAT(E12.5,',',E12.5,',',E12.5,',',E12.5,',',E12.5,',',E12.5)
WRITE(6,3230)
3230 FORMAT(//,' PERFIS DAS CINETICAS DAS REACOES (KMOL/M2.S)',//,
1' ALTURA R6 R7 R12 R13 R14 ',//)
DO 3250 JK=1,J
AZ=Y1(JK)*ZL
WRITE(6,3240) AZ,(YX4(JK,M),M=6,7),(YX6(JK,N),N=2,4)
3250 CONTINUE
3240 FORMAT(E12.5,',',E12.5,',',E12.5,',',E12.5,',',E12.5,',',E12.5)
WRITE(6,2009)
2009 FORMAT(//,'ALTURA(M), TEMP.SUP(oC),TEMP.GAS.(oC)'
*,//)
DO 2010 JK=1,JFGAS
AZ=Y1(JK)*ZL
WRITE(6,1605) AZ,CS(JK,21),CS(JK,20)
1605 FORMAT(F8.6,',',F8.2,',',F8.2)
2010 CONTINUE
C
WRITE(6,7013)
7013 FORMAT(1H1,//, 1X,' PERFIS DE TEMPERATURA NA FASE SOLIDA'
1,//,' ALTURA(M), ' TS(6), ' TG, ' TS(1), '
* TS(2), ' TS(3), ' TS(4), ' TS(5) ',//)
C
DO 263 JK=JFGAS+1,J
AZ=Y1(JK)*ZL
WRITE(6,704) AZ,(YT(JK,M),M=1,7)
263 CONTINUE
704 FORMAT(F8.6,',',F8.2,',',F8.2,',',F8.2,',',F8.2,',',F8.2
*,',',F8.2)
DO 363 JK=JFGAS+1,J
AZ=Y1(JK)*ZL
WRITE(6,704) AZ,(YT(JK,M),M=8,14)
363 CONTINUE
C
WRITE(6,921)
921 FORMAT(//,1X,'ALTURA (M), VAZAO MAS.UM.(KG/S) , UMIDADE B.U.',//)
DO 931 JK=JFGAS+1,J
AZ=Y1(JK)*ZL
WRITE(6,941)AZ,VMUMID(JK),UMBU(JK)
941 FORMAT(E12.5,',',E12.5,',',E12.5)
931 CONTINUE
C
WRITE(6,9999)
9999 FORMAT(//,1H1)
3006 CONTINUE
IF(IOTIMZ.EQ.1.AND.IMPRI.NE.1) WRITE(6,9999)
C
WRITE(6,2026) WC,WH,WO,WN,WS,WZ
2026 FORMAT(//, 'FRACOES MASSICAS DOS COMPONENTES DO MATERIAL A GASE
1IFICAR (BASE UMIDA)',//,
2' WC WH WO WN WS WZ '
3,//,E10.5,',',E10.5,',',E10.5,',',E10.5,',',E10.5,',',E10.5)
C
TVAPC=TVP-273.15

```

TARC=TAR-273.15

C

WRITE(6,2022) RO2CF,RVAPCF,FMAR,FMVP,TARC,TVAPC,POPER,FMMT,DL
*,ZL,DIAMPT,EL,ROMAT,ROCINZ,VPORM

2022 FORMAT(//,

1'RELACAO ENTRE VAZOES MASSICAS DE OXIG. E CARBONO FIXO=',E12.5,/,
2'RELACAO ENTRE VAZOES MASSICAS DE VAPOR E CARBONO FIXO=',E12.5,/,
3'VAZAO MASSICA DE AR (KG/S)=',E12.5,/,
4'VAZAO MASSICA DE VAPOR (KG/S)=',E12.5,/,
5'TEMPERATURA DO AR ALIMENTADO (GC)=',E12.5,/,
6'TEMPERATURA DO VAPOR ALIMENTADO (GC)=',E12.5,/,
7'PRESSAO DE OPERACAO (Pa)=',E12.5,/,
8'VAZAO MASSICA DE MATERIAL A PROCESSAR (KG/S)=',E12.5,/,
9'DIAMETRO MEDIO DO LEITO (M)=',E12.5,/,
1'ALTURA DO LEITO (M)=',E12.5,/,
2'DIAMETRO MEDIO DAS PARTICULAS NA ALIMENTACAO (M)=',E12.5,/,
3'FRACAO DE VAZIOS NO VOLUME DO LEITO =',E12.5,/,
4'DENSIDADE APARENTE DO MATERIAL A PROCESSAR (KG/M3)=',E12.5,/,
5'DENSIDADE APARENTE DAS CINZAS (KG/M3)=',E12.5,/,
6'VOLUME DE POROS POR UNID. DE MASSA DO MAT. A (M3/KG)=',E12.5,/))

C

5007 FORMAT(1X,

* CO, CO2, N2, H2, CH4, C2H '/,
2E10.5,',E10.5,',E10.5,',E10.5,',E10.5,',E10.5,/,
2' H2S, O2, H2O, NH3, NO, SO2, ALC.'
3,/,
4E10.5,',E10.5,',E10.5,',E10.5,',E10.5,',E10.5,',E10.5,
5,/))

C

WRITE(6,5004)

5004 FORMAT(1H1,////,'***** DADOS REFERENTES AO GAS RETIRADO DO TOPO
* SUPERIOR *****',//))

C

WRITE(6,5008)

5008 FORMAT(//,'NOTACAO : GAS QUENTE = GAS PRODUTO COM ALCATRAO E UMIDA
1DE A TEMPERATURA E PRESSAO EM QUE DEIXA O GASEIFICADOR',/,
2'GAS FRIO = GAS PRODUTO ISENTO DE ALCATRAO E UMIDADE A 298K E 101.
3325 KPA',//))

C

WRITE(6,2012)

2012 FORMAT(//,'COMPOSICAO MOLAR (BASE SECA) DO GAS PRODUZIDO (%)',//))

C

WRITE (6,5007)XPGSRS

C

WRITE(6,2050)

2050 FORMAT(//,'COMPOSICAO MOLAR (BASE SECA,LIVRE DE ALCATRAO) DO GAS
*PRODUZIDO (%)',//))

C

WRITE (6,5007)XPGFRS

C

WRITE(6,2013)

2013 FORMAT(//,'FRACOES MASSICAS DOS VARIOS COMPONENTES NO GAS PRODUZI
1DO (BASE UMIDA)',//))

C

WRITE(6,5007) WGRS

C

AMGRS=PMGRS

DEGRS=POPER*AMGRS/(R*TGRS)

FVGRS=FMGRS/DEGRS

```

DENSGZ=1.01325E+05*AMGRS/(R*273.15)
HGRS=HNGRS/AMGRS
PCGQRS=PCGRS+HGRS
HCGQRS=HCGRS+HGRS
PCVGRS=PCGQRS*DEGRS
HCVGRS=HCGQRS*DEGRS
PTGQRS=PCGQRS*FMGRS
PCGFRS=PCGLRS/(1.-WGRS(9))
HCGFRS=HCGLRS/(1.-WGRS(9))
PTGQ=PTGQRS
EFGQ=PTGQ/(PTMT+PTAR+PTVP)
RDGQ=100.*EFGQ
FMGLRS=FMGRS*(1.-WGRS(13))
FMGFRS=FMGRS*(1.-WGRS(13)-WGRS(9))
PTGFRS=PCGFRS*FMGFRS
PTGF=PTGFRS
EFGF=PTGF/(PTMT+PTAR+PTVP)
RDGF=EFGF*100.
FMRZ=FMMT+FMAR+FMVP-FMGRS
WPRZ=FMRZ/FMMT*100.
FMGF=FMGFRS
FMG=FMGRS
FMGL=FMGLRS

```

```

C
WRITE(6,5004)

```

```

C
WRITE(6,5008)

```

```

C
WRITE(6,2014) FNGRS,FMGRS,FMRZ,FMAR,FMVP,AMGRS,FMGFRS,HGRS
2014 FORMAT(/,'VAZAO MOLAR DE GAS      (KMOL/S)=' ,E12.5,
1 //,'VAZAO MASSICA DE GAS PRODUZIDO(KG/S)=' ,E12.5,
2 //,'VAZAO MASSICA RESIDUO FUNDO  (KG/S)=' ,E12.5,
3 //,'VAZAO MASSICA AR      (KG/S)=' ,E12.5,
4 //,'VAZAO MASSICA VAPOR      (KG/S)=' ,E12.5,
5 //,'MASSA MOLECULAR MEDIA GAS  (KG/KMOL)=' ,E12.5,
6 //,'VMAS. GAS FRIO(SEM ALC.E SECO)(KG/S)=' ,E12.5,
7 //,'ENTALPIA SENSÍVEL GAS TOPO  (J/KG)=' ,E12.5)

```

```

C
WRITE(6,4015) PCGRS,PCGLRS,FMGRS,FMGFRS,PTGQ,PTGFRS
4015 FORMAT(/,'PCS GAS COM ALCATRAO  (J/KG)=' ,E12.5,
1//, 'PCS GAS LIMPO      (J/KG)=' ,E12.5,
2//, 'VAZAO GAS QUENTE    (KG/S)=' ,E12.5,
2//, 'VAZAO GAS LIMPO E SECO(KG/S)=' ,E12.5,
2//, 'POTENCIA GAS COM ALCATRAO(W)=' ,E12.5,
3//, 'POTENCIA GAS LIMPO    (W)=' ,E12.5)

```

```

C
C  CALCULO DE PERDA DE CARGA EM PA = PERCG
C

```

```

C
DIAMPM=DIAMPT
IF(MODELQ.EQ.0) DIAMPM=DIAMPT/2.
JM1=1
JM2=IFIX(FLOAT(J)/4.)
JM3=IFIX(FLOAT(J)/2.)
JM4=IFIX(3.*FLOAT(J)/4.)
JM5=J
TMED=(YT(JM1,2)+YT(JM2,2)+YT(JM3,2)+YT(JM4,2)+YT(JM5,2))/5
SDLM=0.
DO 62 K=1,10

```

```

SDLM=SDLM+DLZ(K)
62 CONTINUE
DLM=SDLM/10.
AREAM=PI*DLM**2/4.
TMEDK=TMED+273.15
DELZET=2.*(YT(J-2,2)-YT(1,2))/TMEDK
CALL VISCQ(TMEDK,Y,VIGMZ,AMGM)
DEMG=POPER*AMGM/(R*TMEDK)
AMGRZ=(FMAR*28.9+FMVP*18.015)/(FMAR+FMVP)
DEGRZ=POPER*AMGRZ/(R*(YT(1,2)+273.15))
FMGRZ=FMAR+FMVP
UGRZ=FMGRZ/(DEGRZ*AREAZ0)
UGRS=FMGRS/(DEGRS*AREAZL)
UMG=(FMGRS+FMGRZ)/(2.*DEMG*AREAM)
GAMGE=DEGRZ*G
GAMGM=GAMGE/(1.+TMED/273.15)
RE=0.45*UMG*DIAPPM*DEMG/((1.-EL)*SQRT(EL)*VIGMZ)
AKPC=1.53/EL **4.2
ALAMPB=75.0/RE+15.0/SQRT(RE)+1.
ZETAPC=ALAMPB*AKPC*ZL/DIAPPM+DELZET
PERCG=ZETAPC*GAMGM*UMG**2/(2.*G)
C
WRITE(6,5009)
PRINT*, ' ESTOU NO CALCULO DE DESEMPENHO GASEIFICADOR'
5009 FORMAT(1H1,////, '*****  DADOS REFERENTES AO DESEMPENHO DO GAS
1EIFICADOR  *****',/)
C
WRITE(6,5008)
C
WRITE(6,5006) TSMAX,ZTSMAX,XCT,PHPERD,UGRZ,UMG,PERCG
*,FMRZ,PTGQ,RDQ,PTGF,RDGF,FMG,FMGF
5006 FORMAT(/, 'TEMPERATURA MAXIMA ENCONTRADA FASE SOLIDA (GC)=' ,E12.5
1,/, 'COTA PONTO DE MAXIMA TEMP DA FASE SOLIDA (M)=' ,E12.5
2,/, 'FRACAO TOTAL DE CARBONO CONVERTIDO      =' ,E12.5
4,/, 'ENERGIA PERDIDA POR T. CALOR COM AMBIENTE (%)=' ,E12.5
5,/, 'VELOCIDADE SUPERFICIAL NA BASE DO GAS. (M/S)=' ,E12.5
6,/, 'VELOCIDADE SUPERFICIAL MEDIA DOS GASES (M/S)=' ,E12.5
7,/, 'PERDA DE CARGA AO LONGO DO GASEIFICADOR (Pa)=' ,E12.5
9,/, 'VAZAO DE RESIDUO SOLIDO (KG/S)=' ,E12.5
1,/, 'POT. DO GASEIF. REF. A GAS QUENTE (E PCS) (W)=' ,E12.5
2,/, 'RENDIMENTO A QUENTE DO GASEIFICADOR (%)=' ,E12.5
3,/, 'POT. DO GASEIF. REF. A GAS FRIO (E PCS) (W)=' ,E12.5
4,/, 'RENDIMENTO A FRIO DO GASEIFICADOR (%)=' ,E12.5
5,/, 'VAZAO MASSICA TOTAL DE GAS QUENTE (KG/S)=' ,E12.5
6,/, 'VAZAO MASSICA TOTAL DE GAS FRIO (KG/S)=' ,E12.5
7,/)
C
JARM=(IARM-MINARM)/IPASAR+1
JVAPM=(IVAPM-MINVPM)/IPASVP+1
AARMAT(JARM)=ARMT
XCASO(JVAPM)=VPMT
YCASO(JVAPM,JARM)=RDGF
3001 CONTINUE
3002 CONTINUE
4000 CONTINUE
PRINT*, 'FIM'
STOP
END

```

E-2 SUBROTINA DE CÁLCULO DO DIÂMETRO DO LEITO.

```
SUBROUTINE DIAML(Z)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
COMMON/DAD/UMIDAD,VOLAT,CARFIX,CINZAS,PCSMT,FMMT,ARMT,VPMT,
1TMT,TAR,TVP,POPER,DL,ZL,DIAMPT,ITIPO,IFORM,MODELQ,XO2CB,DLZ(10)
JZ=IFIX(10.*Z/ZL)+1
IF(JZ.GT.10) JZ=10
DL=DLZ(JZ)
RETURN
END
```

E-3 SUBROTINA DE CÁLCULO DO CALOR ESPECÍFICO E ENTALPIA.

```

SUBROUTINE CPH(J,TA,CPJ,HJ,AICP)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C
C CALCULA CALOR ESPECIFICO (J/KMOL*K) ,ENTALPIA (J/KMOL) E
C INTEGRAL DE CP ENTRE 298 E T (J/KMOL)
C
C HJ INCLUI ENTALPIA DE FORMACAO A 298 K
C
C CALCULA CP E AICP AGUA LIQUIDA (I=22)
C   CP= A + B*T - C /T**2
C
C PARA CH4 E C2H6 (I=5,6)
C   CP=A+B*T+C*T**2
C
C PARA ALCATRAO(I=13)
C   CP=A+B*T+C*T**2+D*T**3
C
C   DIMENSION A(19),B(19),C(19),D(19)
C   COMMON/ABC/HF298(13)
C   DATA A/6.79,10.57,6.83,6.52,3.422,1.375,7.81,7.16,7.30,7.11,7.03,
C 1 11.04,-31.203,4.03,0.34,5.37,4.70,5.26,13.38/
C   DATA B/0.98,2.10,0.90,0.78,17.845,41.852,2.96,1.00,2.46,6.00,0.92,
C 11.88,323.24,1.14,0.096,1.52,1.33,-0.10,3.68/
C   DATA C/0.11,2.06,0.12,-0.12,-4.165,-13.827,0.46,0.40,0.,0.37,0.14,
C 1 1.84,-196.18,2.04,0.172,2.72,2.38,-0.36,3.45/
C   DATA D/12*0.0,4.558E-08,6*0.0/
C   T=TA
C   IF(T.GT.2500.)T=2500.
C   IF(T.LT.298.)T=298.
C
C   IF(J.EQ.22) GO TO 22
C
C   CP=A(J) + B(J)*1.0E-03*T -C(J)*1.0E+05/T**2
C   IF(J.EQ.5.OR.J.EQ.6.OR.J.EQ.13) CP=A(J)+B(J)*1.0E-03*T+
C * C(J)*1.0E-06*T*T+D(J)*T**3
C   A1=(T-298.)
C   A2=(T*T-298.*298.)/2.
C   A3=(1./T - 1./298.)
C   A4=(T**4-298.**4)/4.
C   IF(J.EQ.5.OR.J.EQ.6.OR.J.EQ.13) A3=(T**3-298.**3)/3.
C   AICP = A(J)*A1 +B(J)*1.0E-03*A2 +C(J)*1.0E+05*A3
C   IF(J.EQ.5.OR.J.EQ.6.OR.J.EQ.13)AICP=A(J)*A1+B(J)*1.E-03*A2+
C * C(J)*1.0E-06*A3+D(J)*A4
C   AICP=AICP*4.1868E+03
C   IF(J.LE.13) HJ=HF298(J)+AICP
C   IF(J.GE.14) HJ=AICP
C   CPJ=CP*4.1868E+03
C   RETURN
C   P=1.0133E+05

```

```

C
C  CALCULO CALOR ESPECIFICO DE AGUA LIQUIDA
C
22 CALL PH2OLV(T,P,RO,CPJ,CT,VI,PR,1)
  AICP=CPJ*(T-298.)*18.
  HJ=0.
  RETURN
  END

```

E-4 SUBROTINA DE CÁLCULO DOS COEFICIENTES ESTEQUIOMÉTRICOS DAS REAÇÕES QUÍMICAS.

```

SUBROUTINE ESTEQ(TS,CR)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DIMENSION CR(19,14),A(18)
COMMON/VVVVVV/FMTV,FNTV,AV(13),DEV(18),FNV(13),FMV(13),XV,WV
COMMON/FF/F(22)
COMMON/BD/AMW(19)
COMMON/ALCATR/ALC(18)
C
C  CASOS ESPECIAIS
C
C  REACAO 1
C
  TA=TS
  IF(TA.GT.2500.) TA=2500.
  IF(TA.LT.298.) TA=298.
  RAZAO= 2500.*EXP(-6240./TA)
  CR(14,1)=-1.
  CR(14,2)=-1.
  DO 1 K=15,18
    A(K)=F(K)*AMW(14)/F(14)/AMW(K)
    CR(K,1)=-A(K)
    CR(K,2)=-A(K)
1 CONTINUE
  CR(1,1)=RAZAO/(1.+RAZAO)
  CR(2,1)=1./(1.+RAZAO)
  CR(8,1)=- (2.+RAZAO)/(2.*RAZAO+2.)-A(15)/4.+A(16)/2.-A(17)/2.-A(18)
  CR(9,1)=A(15)/2.
  CR(11,1)=A(17)
  CR(12,1)=A(18)
C
C  REACAO 2
C
  CR(1,2)=1.
  CR(3,2)=A(17)/2.
  CR(4,2)=1.+A(15)/2.-A(16)-A(18)
  CR(7,2)=A(18)
  CR(9,2)=-1.+A(16)
C
C  REACAO 6

```

```

C
  CR(1,6)=2.
  CR(10,6)=A(17)
  CR(9,6)=A(16)
  CR(7,6)=A(18)
  CR(2,6)=-1.
  CR(4,6)=(A(15)/2.-A(16)-1.5*A(17)-A(18))
C
C   REACAO 7
C
  CR(5,7)=1.
  CR(10,7)=A(17)
  CR(9,7)=A(16)
  CR(7,7)=A(18)
  CR(4,7)=-(2.-A(15)/2.+A(16)+1.5*A(17)+A(18))
C
C   REACAO 12
C
  DO 7 K=1,12
    CR(K,12)=AV(K)
  7 CONTINUE
  CR(13,12)=AV(13)
  CR(14,12)=-(AV(1)+AV(2)+AV(5)+2.*AV(6)+ALC(14)*AV(13))
  CR(15,12)=-(2.*AV(4)+4.*AV(5)+6.*AV(6)+2.*AV(7)+2.*AV(9)+
* 3.*AV(10)+ALC(15)*AV(13))
  CR(16,12)=-(AV(1)+2.*AV(2)+2.*AV(8)+AV(9)+AV(11)+2.*AV(12)+
* ALC(16)*AV(13))
  CR(17,12)=-(2.*AV(3)+AV(10)+AV(11)+ALC(17)*AV(13))
  CR(18,12)=-(AV(7)+AV(12)+ALC(18)*AV(13))
C
C   REACAO 13
C
  DO 4 K=1,12
    CR(K,13)=AV(K)
  4 CONTINUE
  CR(13,13)=-1.+AV(13)
C
  RETURN
  END

```

E-5 SUBROTINA DE CONVERGÊNCIA CONV.

```

SUBROUTINE CONV(X,Y,NR,NC,ECONV)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DIMENSION XA(10),YA(10)
IF(ABS((X-Y)/(X+Y)).LT.ECONV) GO TO 6
IF(NC.LE.1) GO TO 5
XT=(XA(NR)*Y-YA(NR)*X)/(XA(NR)-X+Y-YA(NR))
XA(NR)=X
YA(NR)=Y
X=XT
RETURN
5 XA(NR)=X
YA(NR)=Y
X=Y
NC=2
RETURN
6 X=Y
NC=1
RETURN
END

```

E-6 SUBROTINA DE CÁLCULO DA ENTALPIA DE COMBUSTÃO

```

SUBROUTINE ENTCOM(W,HCG,HCGL,PCSG,PCSGL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C CALCULO DE ENTALPIA DE COMBUSTAO (PCI) E DE PODER CALORIFICO
C SUPERIOR (PCS) DE GAS
C
C ENTRADAS :
C
C W(J) : FRACOES MASSICAS DOS VARIOS COMPONENTES NO GAS
C
C SAIDAS :
C
C
C HCG      : ENTALPIA DE COMBUSTAO DO GAS (COM ALCATRAO) A 298K   (J/KG)
C
C HCGL     : ENTALPIA DE COMBUSTAO DO GAS (SEM ALCATRAO POREM
C            UMIDO) A 298 K                                         (J/KG)
C PCSG     : PODER CALORIFICO SUPERIOR DO GAS (COM ALCATRAO) A
C            298 K                                                  (J/KG)
C PCSGL    : PODER CALORIFICO SUPERIOR DO GAS (SEM ALCATRAO

```

```

C          POREM UMIDO) A 298 K                      (J/KG)
C
C  VARIAVEIS DE OPERACAO :
C
C
C  HF298(J) : ENTALPIA DE FORMACAO DO COMP.'J' A 298K      (J/KMOL)
C  HCC(J)   : ENTALPIA DE COMBUSTAO DO COMP.'J' A 298K      (J/KMOL)
C  HC(J)    : ENTALPIA DE COMBUSTAO DO COMP.'J' A 298K      (J/KG)
C  PCSN(J)  : PODER CALORIFICO SUPERIOR DO COMP.'J' A 298K  (J/KMOL)
C  PCS(J)   : PODER CALORIFICO SUPERIOR DO COMP.'J' A 298K  (J/KG)
C
C  DIMENSION HCC(13),HC(13),W(13),PCSN(13),PCS(13)
C  COMMON/BD/AMW(19)
C  COMMON/ABC/HF298(13)
C  COMMON/ALCATR/ALC(18)
C
C  REACOES PARA CALCULO DE ENTALPIA DE COMBUSTAO :
C
C  CO+ 1/2 O2      =      CO2
C  CH4+ 2O2        =      CO2 +2H2O
C  C2H6 + 7/2 O2   =      2CO2 +3H2O
C  H2S + 3/2 O2    =      H2O + SO2
C  NH3 + 5/4 O2    =      NO + 3/2 H2O
C  H2+ 1/2 O2      =      H2O
C
C  DO 400 J=1,13
C  HCC(J)=0.
C  HC(J)=0.
C  PCS(J)=0.
C  PCSN(J)=0.
400 CONTINUE
C  HFH2OL=-286.021E+06
C  HCC(1) = HF298(1)- HF298(2)
C  PCSN(1)= HCC(1)
C  HCC(6)= HF298(6)- 2.*HF298(2)-3.*HF298(9)
C  PCSN(6)= HF298(6)- 2.*HF298(2)-3.*HFH2OL
C  HCC(5)= HF298(5)-HF298(2)-2.*HF298(9)
C  PCSN(5)= HF298(5)-HF298(2)-2.*HFH2OL
C  HCC(4)= -HF298(9)
C  PCSN(4)= -HFH2OL
C  HCC(7)= HF298(7)- HF298(9)-HF298(12)
C  PCSN(7)= HF298(7)-HFH2OL-HF298(12)
C  HCC(10)= HF298(10)- HF298(11)-1.5*HF298(9)
C  PCSN(10)= HF298(10)- HF298(11)-1.5*HFH2OL
C  HCC(13)=5.1545E+09
C  PCSN(13)=6.2179E+09
C  HCG=0.
C  HCGL=0.
C  PCSG=0.
C  PCSGL=0.
C  DO 1 I=1,13
C  HC(I) = HCC(I)/AMW(I)
C  PCS(I) =PCSN(I)/AMW(I)
C  HCG=HCG+HC(I)*W(I)
C  PCSG=PCSG+PCS(I)*W(I)
C  IF(I.NE.13.AND.W(13).NE.1.) HCGL=HCGL+HC(I)*W(I)/(1.-W(13))
C  IF(I.NE.13.AND.W(13).NE.1.) PCSGL=PCSGL+PCS(I)*W(I)/(1.-W(13))
1 CONTINUE
C

```

```

IF(W(13).EQ.1.) HCGL=HCG
IF(W(13).EQ.1.) PCSGL=PCSG
RETURN
END

```

E-7 SUBROTINA DE CÁLCULO DAS FRAÇÕES MOLARES.

```

SUBROUTINE WPARAX(W,X,AMM)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C
C   DIMENSION X(13),W(13)
C   COMMON/BD/AMW(19)
C
C ENTRADAS :
C
C W(J)      : FRACOES MASSICAS
C
C SAIDAS :
C
C X(J)      : FRACOES MOLARES
C AMM       : MASSA MOLECULAR MEDIA
C
C   AMM=0.
C   SRXM=0.
C   DO 10 I=1,13
10 SRXM=SRXM +W(I)/AMW(I)
C   DO 20 J=1,13
C   X(J)=(W(J)/AMW(J))/SRXM
20 AMM=AMM+AMW(J)*X(J)
RETURN
END

```

E-8 SUBROTINA DE CÁLCULO DAS FRAÇÕES MOLARES.

```

      SUBROUTINE XPARAW(X,W,AMM)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C
      DIMENSION X(13),W(13)
      COMMON/BD/AMW(19)
C
C  ENTRADAS :
C
C  X(J)      : FRACOES MOLARES
C
C  SAIDAS :
C
C  W(J)      : FRACOES MASSICAS
C  AMM       : MASSA MOLECULAR MEDIA
C
      AMM=0.
      DO 10 I=1,13
10  AMM= AMM+AMW(I)*X(I)
      DO 20 J=1,13
20  W(J)=X(J)*AMW(J)/AMM
      RETURN
      END

```

E-9 SUBROTINA DE CÁLCULO DA TAXA DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR ENTRE A PAREDE EXTERNA DO GASEIFICADOR E O MEIO AMBIENTE.

```

      SUBROUTINE QEXRC(T,AEX,QEX,TEXP,CTTEX,CTTIS,FQEX)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C
C  CALCULA TAXA DE CALOR TROCADO POR RADIAÇÃO E CONVECÇÃO ENTRE
C  VASO E MEIO AMBIENTE
C  SUPOE SEMPRE HAVER ISOLAMENTO (XIS E KIS NAO NULOS)
C  SUPOE RESISTENCIA A TROCA DE CALOR INTERNA MUITO MENOR QUE
C  RESISTENCIA OFERECIDA PELO ISOLAMENTO
C  DADOS :
C  T      = TEMPERATURA INTERNA NO VASO                (K)
C  TAMB   = TEMPERATURA AMBIENTE                        (K)
C  VV     = VELOCIDADE MEDIA LOCAL DO VENTO             (M/S)
C  EPS    = EMISSIVIDADE DA PAREDE EXTERNA
C  AEX    = AREA EXTERNA DO VASO NA PARTE DE INTERESSE (M2)
C  XIS    = ESPESSURA DO ISOLAMENTO                    (M)

```

C KIS = CONDUTIVIDADE TERMICA DO ISOLAMENTO (W/M*K)
 C
 C SAIDAS :
 C
 C QEX = TAXA DE CALOR PERDIDA (-) OU RECEBIDA (+) PARA OU
 C DO MEIO AMBIENTE (RADIACAO E CONVECCAO) (W)
 C TEXP = TEMPERATURA DA PAREDE EXTERNA (K)
 C CTTEX = COEFICIENTE DE TROCA TERMICA TOTAL(RAD+CONVEC)
 C ENTRE AMBIENTE E PAREDE EXTERNA (W/M2*K)
 C CTTIS = COEFICIENTE DE TROCA TERMICA EQUIVALENTE PARA O
 C ISOLAMENTO W/M2*K)
 C FQEX = FLUXO DE CALOR PERDIDO(-) OU RECEBIDO(+) PELO VASO
 C (W/M2)
 C

```

EXTERNAL HAMB
REAL KIS
COMMON/QQ/TEXT,VV,EPS,XIS,KIS
IF(T.LT.300.) GO TO 4
L=0
NC2=0
TAMB=TEXT
TEXP=(T+TAMB)/2.
1 CONTINUE
CTTEX= HAMB(TEXP,TAMB,VV,EPS)
CTTIS= KIS/XIS
TEXPC= (CTTIS*T+CTTEX*TAMB)/(CTTIS+CTTEX)
L=L+1
IF(L.LE.20) GO TO 3
100 FORMAT(///,10X,'A CONVERGENCIA PARA TEXP NAO FOI OBTIDA',//,
1 2X,'TEXP=',E12.5,2X,'TEXPC=',E12.5,2X,'T=',E12.5,/,2X,'TAMB=',
2 E12.5,2X,'CTTIS=',E12.5,2X,'CTTEX=',E12.5,/,5X,'TEXT=',E12.5,/)
PRINT 100,TEXP,TEXPC,T,TAMB,CTTIS,CTTEX,TEXT
GO TO 4
3 CONTINUE
ECONV=1.0E-04
CALL CONV(TEXP,TEXPC,2,NC2,ECONV)
GO TO (2,1),NC2
2 CONTINUE
FQEX=-CTTIS*(T-TEXP)
QEX=FQEX*AEX
RETURN
4 CONTINUE
FQEX=0.
QEX=0.
RETURN
END
  
```

E-10 FUNÇÃO DE CÁLCULO DO COEFICIENTE DE PELÍCULA DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR ENTRE A PAREDE EXTERNA DO GASEIFICADOR E O MEIO AMBIENTE.

```

FUNCTION HAMB(TEXP,TAMB,VV,EPS)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C
C CALCULA COEFICIENTE DE TROCA DE CALOR ENTRE PAREDE (FACE
C EXTERNA) E MEIO AMBIENTE
C
C DADOS :
C
C TEXP      = TEMPERATURA EXTERNA DA PAREDE      (K)
C TAMB      = TEMPERATURA AMBIENTE                (K)
C VV        = VELOCIDADE DO VENTO                 (M/S)
C EPS       = EMISSIVIDADE DA PAREDE
C
  IF(TEXP.EQ.TAMB) GO TO 1
  DELT4=((TEXP/100.)**4-(TAMB/100.)**4)/(TEXP-TAMB)
  HAMB = 1.9468*(ABS(TEXP-TAMB))**0.25*SQRT(2.8633*VV+1.)+5.75*EPS*
  *DELT4
  GO TO 2
1 HAMB=0.
2 CONTINUE
  RETURN
  END

```

E-11 SUBROTINA DE CÁLCULO DA VISCOSIDADE.

```

SUBROUTINE VISC(TG,Y,VIGM,AMGM)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C
C CALCULA VISCOSIDADE MEDIA DE MISTURA DE GASES
C RESULTADOS EM UNIDADES DO S.I. (PA*S)
C
  DIMENSION Y(13),VIG(13),A(13),B(13),C(13)
  COMMON/BD/AMW(19)
  DATA A/32.28,25.45,30.43,21.87,15.96,5.576,-9.372,18.11,-31.89,
  *-9.372,56.77,-3.593,32.28/
  DATA B/47.47,45.49,49.89,22.2,34.39,30.64,38.99,66.32,41.45,38.99,
  *48.14,46.45,47.47/
  DATA C/-96.48,-86.49,-109.3,-37.51,-81.40,-53.07,-44.05,-187.9,
  *-8.272,-44.05,-84.34,-72.76,-96.48/

```

```

T=TG
IF(T.GT.1800.) T=1800.
IF(T.LT.298.) T=298.
SM=0.
DO 10 I=1,13
BI=B(I)*1.0E-02
CI=C(I)*1.0E-06
VIG(I)=A(I)+BI*T+CI*T*T
SM=SM+Y(I)*AMW(I)
10 CONTINUE
AMGM=SM
SN=0.
SD=0.
DO 20 I=1,13
SN=SN+Y(I)*VIG(I)*AMW(I)**0.5
VIG(I)=VIG(I)*1.0E-07
20 SD=SD+Y(I)*AMW(I)**0.5
VIGM=(SN/SD)*1.0E-07
RETURN
END

```

E-12 SUBROTINA DE CÁLCULO DA VELOCIDADE SUPERFICIAL DOS GASES.

```

SUBROUTINE VELGAS(TG,DEG,UG,AMG)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C
C CALCULA VELOCIDADE SUPERFICIAL DOS GASES EM M/S
C
COMMON/DAD/UMIDAD,VOLAT,CARFIX,CINZAS,PCSMT,FMMT,ARMT,VPMT,
1TMT,TAR,TVP,POPER,DL,ZL,DIAMPT,ITIPO,IFORM,MODELQ,XO2CB,DLZ(10)
COMMON/SSS/Y(19),WG(13),AMMG,FNG,FMS
COMMON/BD/AMW(19)
AMG=0.
DO 10 I=1,13
10 AMG=AMG+Y(I)*AMW(I)
R=8314.2
PI=3.141592
DEG=POPER*AMG/(R*TG)
AREASI=PI*DL**2/4.
FMG=FNG*AMG
FVGRS=FMG/DEG
UG=FVGRS/AREASI
RETURN
END

```

E-13 SUBROTINA DE CÁLCULO DA CONDUTIVIDADE DE MISTURA DE GASES.

```

SUBROUTINE CONDTG(T,CTGM)
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C
C  CALCULA CONDUTIVIDADE TERMICA DE MISTURA DE GASES
C  CTGM EM W/M*K
C
  DIMENSION A(13),B(13),C(13),D(13),CTG(13)
  COMMON/BD/AMW(19)
  COMMON/SSS/Y(19),WG(13),AMMG,FNG,FMS
  DATA A/1.21,-17.23,0.9359,19.34,-4.463,-75.8,0.91,-0.7816,17.53,
10.91,11.99,-19.31,1.21/
  DATA B/21.79,19.14,23.44,159.74,20.84,52.57,12.87,23.8,-2.42,12.87
1,17.18,15.15,21.79/
  DATA C/-0.8416,0.1308,-1.21,-9.93,2.815,-4.593,2.93,-0.8939,4.3,
12.93,-0.02,-0.33,-0.8416/
  DATA D/1.958,-2.514,3.591,37.29,-8.631,39.74,-8.68,2.324,-21.73,
1-8.68,-0.85,0.55,1.958/
  TG=T
  IF(TG.GT.1800.) TG=1800.
  IF(TG.LT.298.) TG=298.
  DO 10 I=1,13
    BI=B(I)*1.0E-02
    CI=C(I)*1.0E-04
    DI=D(I)*1.0E-08
    CTG(I)=A(I)+BI*TG+CI*TG*TG+DI*TG*TG*TG
10 CONTINUE
  SN=0.
  SD=0.
  DO 20 I=1,13
    SN=SN+Y(I)*CTG(I)*AMW(I)**(1./3.)
    SD=SD+Y(I)*AMW(I)**(1./3.)
    CTG(I)=CTG(I)*4.1868E-04
20 CONTINUE
  CTGM=(SN/SD)*4.1868E-04
  RETURN
END

```

E-14 SUBROTINA DE CÁLCULO DO CALOR ESPECÍFICO DE MISTURA DE GASES.

```

SUBROUTINE CALESG(Y,TG,CPGM)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C
C CALCULA CALOR ESPECIFICO DE MISTURA DE GASES
C CPGM EM J/KG*K
C
  DIMENSION Y(13)
  COMMON/BD/AMW(19)
  TGAUX=TG
  IF(TG.GT.2500.) TG=2500.
  IF(TG.LT.298.) TG=298.
  SCPG=0.
  SAM=0.
  DO 10 I=1,13
    CALL CPH(I,TG,CPG,HG,AICP)
    SAM=SAM+Y(I)*AMW(I)
    SCPG=SCPG+Y(I)*CPG
10 CONTINUE
  CPGM=SCPG/SAM
  TG=TGAUX
  RETURN
  END

```

E-15 SUBROTINA DE CÁLCULO DO CALOR ESPECÍFICO DA FASE SÓLIDA.

```

SUBROUTINE CALESS(TS,CPSM)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C
C CALCULA CALOR ESPECIFICO DE FASE SOLIDA
C CPSM EM J/KG*K
C
  COMMON/DAD/UMIDAD,VOLAT,CARFIX,CINZAS,PCSMT,FMMT,ARMT,VPMT,
  1TMT,TAR,TVP,POPER,DL,ZL,DIAMPT,ITIPO,IFORM,MODELQ,XO2CB,DLZ(10)
  COMMON/SSS/Y(19),WG(13),AMMG,FNG,FMS
C
C CALCULA CALOR ESPECIFICO DOS SOLIDOS EM UNIDADES SI (J/KG*K)
C
  GO TO(1,2,3),ITIPO
1 CONTINUE
C

```

```

C CASO DE CARVAO MINERAL
C
  IF(Y(14).EQ.0..AND.Y(19).EQ.0.) Y(14)=1.
  CPSC=1.405E+03+3.974E-01*TS-7.112E+07/TS/TS
  CPSZ=9.337E+02+2.568E-01*TS-2.407E+07/TS/TS
  CPSM=(CPSC*Y(14)+CPSZ*Y(19))/(Y(14)+Y(19))
  RETURN
2 CONTINUE
C
C CASO DE CARVAO VEGETAL
C
C
  GO TO 1
3 CONTINUE
C
C CASO DE MADEIRA
C
  IF(TS.GT.400.) GO TO 2
  CPSM=0.259+9.75E-04*UMIDAD+6.05E-04*TS+1.3E-05*UMIDAD*TS
  CPSM=CPSM*4.1868E+03
  RETURN
END

```

E-16 SUBROTINA DE CÁLCULO DAS CINÉTICAS DAS REAÇÕES QUÍMICAS.

```

SUBROUTINE CINET(NCPIROL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C
C
C ESTIMA AS TAXAS DAS REACOES ENVOLVIDAS
C UNIDADES PARA REACOES HOMOGENEAS RRN(I) = KMOL/M3*S
C UNIDADES PARA REACOES HETEROGENEAS RRN(I) = KMOL/M2*S
C
C
C REACAO 1  C + O2 = CO + CO2
C REACAO 2  C + H2O = CO + H2
C REACAO 3  CO + H2O = CO2 + H2
C REACAO 4  2 CO + O2 = 2 CO2
C REACAO 5  2 H2 + O2 = 2 H2O
C REACAO 6  CO2 + C = 2 CO
C REACAO 7  C + 2 H2 = CH4
C REACAO 8  CH4 + 2 O2 = CO2 + 2 H2O
C REACAO 9  2 C2H6 + 7 O2 = 4 CO2 + 6 H2O
C REACAO 10 4 NH3 + 5 O2 = 4 NO + 6 H2O
C REACAO 11 2 H2S + 3 O2 = 2 SO2 + 2 H2O
C REACAO 12 MATERIALVOLATIL = AV(1) CO +AV(2) CO2 +...+ AV(13) ALCATRAO
C REACAO 14 MATERIAL UMIDO = H2O + MATERIAL SECO
C
COMMON/SSS/Y(19),WG(13),AMMG,FNG,FMS
COMMON/RRR/ROMAT,ROCINZ,VPORM,EL,EP,ROGB,ROREAL,JAFCMC,
* VPORZ,X0CFX,X0VOL
COMMON/BD/AMW(19)

```

```

COMMON/WWWWW/FMTV,FNTV,AV(13),DEV(18),FNV(13),FMV(13),XV,WV
COMMON/WWWWW1/YV(13)
COMMON/RCINNN/RRN(14)
COMMON/PARRR4/AREA,TS,TG,PID,FQEX,HTPERD,AEXDZ,QEX,TSH2O,TASECG
* ,AREAZ0,AREAZL
COMMON/PARRR5/PI,R,CPS,DP,ROP,DZ,P,HGG,HSS,HTCSG,HTMSG,TEXP,TEBAC
COMMON/PARRR7/C,HI,O,AN,S,CINZ,CETM,HIETM,OETM,ANETM,SETM,ZETM,XC
* ,UMIETM,FAUXDP,ZLEITO
COMMON/DAD/UMIDAD,VOLAT,CARFIX,CINZAS,PCSMT,FMMT,ARMT,VPMT,
*TMT,TAR,TVP,POPER,DL,ZL,DIAMPT,ITIPO,IFORM,MODELQ,XO2CB,DLZ(10)
COMMON/APRRRR/APR(3,18)
COMMON/PIR/FCON14
REAL KO(18),KR(18),KEQO(18),KEQ(18),ESR(18),DHSR(18)
REAL KTM,KO61,KO62,KO63,PP(13),PPEQ(13)
REAL K1R6,K2R6,K3R6
DO 30 K=1,14
  RRN(K)=0.
DO 30 KK=1,3
  APR(KK,K)=0.
30 CONTINUE
  TF=(TS+TG)/2.
C
  RAZAO=2500.*EXP(-6240./TS)
C
  CMG=POPER/(R*TG)
  XCARV=1.-Y(19)
  DO 31 I=1,13
    PP(I)=P*Y(I)
    IF(PP(I).LT.0.) PP(I)=0.
31 CONTINUE
C
  TETAM=ROP*VPORM
  TETAZ=ROCINZ*VPORZ
C
  DATA KO/17.67,4.066E-03,2.91E-11,5.970E+07,2.2E+11,1.38,
* 2.354E-11,2.0E+10,2.0E+10,2.0E+10,2.0E+10,0.0,
* 9.7E+09,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0/
  DATA ESR/13596.5,17625.03,4899.39,8052.5,8450.,24000.,
* 13672.5,4530.,4530.,4530.,4530.,0.0,
* 14589.5,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0/
  DATA KEQO/0.0,3.13905E+12,0.0265,0.0,0.0,1.23819E+14,1.45275E-11,
* 11*0.0/
  DATA DHSR/0.0,16344.44,-3958.08,0.0,0.0,20293.96,-11006.58,
* 11*0.0/
  DATA KO61,KO62,KO63/1.38,1.4E-07,2.07E-06/
  DATA ESR61,ESR62,ESR63/24000.,-7500.,-3200./
C
  RP=DIAMPT/2.
  DO 200 IP=1,11
    RRN(IP)=0.
200 CONTINUE
  GO TO(1,2,3),ITIPO
  1 CONTINUE
C
C CASO DE CARVAO MINERAL
C
  PRINT 100,ITIPO
100 FORMAT(//,10X,'PROGRAMA NAO PREPARADO PARA CARVAO MINERAL',/,5x,
* ITIPO= ',I10)

```

```

      STOP
      GO TO 20
2 CONTINUE
C
C CASO DE CARVAO VEGETAL
C
      3 CONTINUE
C
C CASO DE MADEIRA
C
      KO61=1.24E+03
      KO62=1.24E-13
      KO63=3.12E+01
      ESR61=29600.
      ESR62=-22900.
      ESR63=15100.
C
      20 CONTINUE
      DO 32 I=1,14
      TB=TG
      IF(I.EQ.1.OR.I.EQ.2.OR.I.EQ.6.OR.I.EQ.7.OR.I.EQ.12.OR.I.EQ.14
*) TB=TS
      KR(I)=KO(I)*EXP(-ESR(I)/TB)
      KEQ(I)=KEQO(I)*EXP(-DHSR(I)/TB)
      32 CONTINUE
C
C COMANDO DE DESVIO PARA REACOES HOMOGENEAS NA REGIAO DE SECAGEM E
PIROLISE
C
      IF(NCPIROL.EQ.1) GO TO 888
C
      KR(7)=KR(7)*PP(4)/(1.+4.752E-12*EXP(11096./TG)*PP(4))
      K1R6=KO61*EXP(-ESR61/TS)
      K2R6=KO62*EXP(-ESR62/TS)
      K3R6=KO63*EXP(-ESR63/TS)
      KR(6)=K1R6/(1.+K2R6*PP(1)+K3R6*PP(2))
      DIFU=8.6776E-05*TF**1.75/P
      DIFEF=DIFU*TETAM**2
      DIFUZ=DIFU*TETAZ**2
C
      AUXDIF=SQRT(AMW(1)/AMW(13))
      IF(FAUXDP.LE.0.) FAUXDP=1.0E-10
      IF(FAUXDP.GT.1.) FAUXDP=1.0
C
C   CORPOS ESFERICOS :IFORM=1
C
      IF(IFORM.EQ.1) THEN
      FRNC=FAUXDP**(1./3.)
      END IF
C
C   CORPOS CILINDRICOS :IFORM=2
C
      IF(IFORM.EQ.2) THEN
      FRNC=FAUXDP**0.5
      END IF
C
C   CORPOS PLANOS :IFORM=3
C
      IF(IFORM.EQ.3) THEN

```

```

      FRNC=FAUXDP
C
C      REACAO 1
C      C + GMO21*O2 ----> RAZAO*CO + (2-RAZAO)*CO2
C
      GMO21=(RAZAO+2.)/(2.*RAZAO+2.)
      FI1=RP*SQRT(KR(1)*X0CFX/(GMO21*DIFEF/(R*TG)))
      IF(FI1.EQ.0.) GO TO 311
      PO2EQ=0.
      CALL VISCQ(TF,Y,VIGM,AMGM)
      DEMG=POPER*AMGM/(R*TF)
      SC=VIGM/(DEMG*DIFU)
      ASTG=PI*DL**2/4.
      GNG=FNG/ASTG
      UG=GNG*AMGM/DEMG
      IF(MODELQ.EQ.0) THEN
        RE=UG*DIAMPT*FRNC*DEMG/VIGM
        SH=2.06*RE**0.425*SC**(1./3.)/EL
        KTM=SH*DIFU/(RP*FRNC)
      END IF
      IF(MODELQ.EQ.1) THEN
        RE=UG*DIAMPT*DEMG/VIGM
        SH=2.06*RE**0.425*SC**(1./3.)/EL
        KTM=SH*DIFU/RP
      END IF
C
C      COM RESISTENCIA DEVIDO A CAMADA DE CINZAS
C
      ALFA1=DIFEF/DIFUZ*FI1*TANH(FI1*FRNC)
      APR(1,1)=1./(KTM*RP)
      APR(2,1)=(1.-FRNC)/DIFUZ
      APR(3,1)=1./(DIFUZ*ALFA1)
C
      IF(MODELQ.EQ.0.AND.JAFCMC.EQ.0) GO TO 316
      RRN(1)=(PP(8)-PO2EQ)/(RP*R*TS)/(APR(1,1)+APR(2,1)+APR(3,1))
      GO TO 311
316 CONTINUE
C
C      SEM RESISTENCIA DEVIDO A CAMADA DE CINZAS
C
      RRN(1)=(PP(8)-PO2EQ)/(RP*R*TS)/(APR(1,1)+APR(3,1))
311 CONTINUE
C
C      REACAO 2
C
C      C + H2O --> H2 + CO
C
      PPEQ(9)=PP(1)*PP(4)/KEQ(2)
      DPH2O=PP(9)-PPEQ(9)
      IF(ABS(DPH2O).LT.(PP(9)/1000.)) GO TO 314
      FI2=RP*SQRT(KR(2)*X0CFX/(DIFEF/(R*TG)))
      IF(FI2.EQ.0.) GO TO 314
      APR(1,2)=APR(1,1)
      APR(2,2)=APR(2,1)
      ALFA2=DIFEF/DIFUZ*FI2*TANH(FI2*FRNC)
      APR(3,2)=1./(DIFUZ*ALFA2)
      IF(MODELQ.EQ.0.AND.JAFCMC.EQ.0) GO TO 317
      RRN(2)=DPH2O/(R*TS*RP)/(APR(1,2)+APR(2,2)+APR(3,2))
      GO TO 314

```

```

317 CONTINUE
  RRN(2)=DPH2O/(R*TS*RP)/(APR(1,2)+APR(3,2))
314 CONTINUE
  IF(RRN(2).LT.0.) PRINT*, 'RRN(2)<0.'
C
C   REACAO 6
C
C   CO2+C --> 2CO
C
  FI6=RP*SQRT(KR(6)*X0CFX/(DIFEF/(R*TG)))
  IF(FI6.EQ.0.) GO TO 322
  PPEQ(2)=PP(1)**2/KEQ(6)
  DPCO2=PP(2)-PPEQ(2)
  IF(ABS(DPCO2).LT.(PP(2)/1000.)) GO TO 322
  APR(1,6)=APR(1,1)
  APR(2,6)=APR(2,1)
  ALFA6=DIFEF/DIFUZ*FI6*TANH(FI6*FRNC)
  APR(3,6)=1./(DIFUZ*ALFA6)
  IF(MODELQ.EQ.0.AND.JAFCMC.EQ.0) GO TO 319
  RRN(6)=DPCO2/(R*TS*RP)/(APR(1,6)+APR(2,6)+APR(3,6))
  GO TO 322
319 CONTINUE
  RRN(6)=DPCO2/(R*TS*RP)/(APR(1,6)+APR(3,6))
322 CONTINUE
  IF(RRN(6).LT.0.) PRINT*, 'RRN(6)<0.'
C
C   REACAO 7
C
C   C + 2H2 --> CH4
C
  GMH27=2.
  PPEQ(4)=SQRT(PP(5)/KEQ(7))
  DPH2=PP(4)-PPEQ(4)
  IF(ABS(DPH2).LT.(PP(4)/1000.)) GO TO 315
  FI7=RP*SQRT(KR(7)*X0CFX/(GMH27*DIFEF/(R*TG)))
  IF(FI7.EQ.0.) GO TO 315
  APR(1,7)=APR(1,1)
  APR(2,7)=APR(2,1)
  ALFA7=DIFEF/DIFUZ*FI7*TANH(FI7*FRNC)
  APR(3,7)=1./(DIFUZ*ALFA7)
  IF(MODELQ.EQ.0.AND.JAFCMC.EQ.0) GO TO 318
  RRN(7)=DPH2/(R*TS*RP)/(APR(1,7)+APR(2,7)+APR(3,7))
  GO TO 315
318 CONTINUE
  RRN(7)=DPH2/(R*TS*RP)/(APR(1,7)+APR(3,7))
315 CONTINUE
  END IF
888 CONTINUE
C
C REACAO 3 - DE SAI E WEN COM MODIFICACOES NO TEOR DE CINZA
C
  DR3=(PP(1)*PP(9)-PP(2)*PP(4)/KEQ(3))
  IF(ABS(DR3).LT.(PP(1)*PP(9)/1000.)) DR3=0.
  AUXR3=DR3*(1.-EL)*(Y(19)*ROMAT*FAUXDP+ROCINZ*(1.-FAUXDP))
  RRN(3)=KR(3)*AUXR3
  IF(RRN(3).LT.0.) PRINT*, 'RRN(3)=', RRN(3)
C
C   REACAO 4
C

```

```

FAUXR4=0.
IF(PP(8).EQ.0.) GO TO 23
FAUXR4=KR(4)*EL*CMG**1.8*Y(9)**0.5*17.5*Y(8)/(1.+24.7*Y(8))
RRN(4)=FAUXR4*Y(1)
23 CONTINUE
C
C   REACAO 5
C
C   RRN(5)=FAUXR4*Y(4)
C
C   REACAO 8
C
C   RRN(8)=FAUXR4*Y(5)
C
C   REACAO 9
C
C   RRN(9)=FAUXR4*Y(6)
C
C   REACAO 10
C
C   RRN(10)=FAUXR4*Y(10)
C
C   REACAO 11
C
C   RRN(11)=FAUXR4*Y(7)
C
C   REACAO 13
C
C   RRN(13)=0.
RETURN
END

```

E-17 SUBROTINA DE CÁLCULO DAS PROPRIEDADES FÍSICAS DA ÁGUA NAS FASES LÍQUIDA E VAPOR.

```

SUBROUTINE PH2OLV(T,PA,RO,CP,CT,VI,PR,ILV)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C
C  CALCULA PROPRIEDADES FISICAS DA AGUA LIQUIDA OU VAPOR
C
C  UNIDADES DO SISTEMA INTERNACIONAL
C
C  NOTACAO :
C
C  T   = TEMPERATURA                (K)
C  PA  = PRESSAO                    (PA)
C  RO  = DENSIDADE                   (KG/M3)
C  CP  = CALOR ESPECIFICO A PRESSAO CONSTANTE  (J/KG*K)
C  CT  = CONDUTIVIDADE TERMICA      (W/M*K)
C  VI  = VISCOSIDADE                (KG/M*S)
C  PR  = NUMERO DE PRANDTL

```

```

C ILV = INDICE QUE INDICA O ESTADO DA AGUA
C (ILV=0 OU 1 = AGUA LIQUIDA ; 2= AGUA VAPOR)
C
  TA=T
  IF(TA.GT.647.35) GO TO 1
  IF(TA.LT.273.2) TA=273.2
  IF(ILV.EQ.2) GO TO 1
  AUXRO= (1.-TA/647.35)**(2./7.)
  RO= 347.1*0.2740**(-AUXRO)
C
  CP= 4186.8*(0.6741+2.825E-03*TA-8.371E-06*TA**2+8.601E-09*TA**3)
C
  CT= 4.1868E-04*(-916.62+12.5473*TA-152.12E-04*TA**2)
C
  AUXVI = -10.73+1828./TA +1.966E-02*TA-14.66E-06*TA**2
  VI= 1.0E-03*10.0**AUXVI
  GO TO 2
C
1 CONTINUE
C
  CALL TBAGUA(PA,TSAT,HVH2O)
  IF(TA.GT.TSAT) GO TO 3
  AV=430.8419
  BV=1.66
  CV=0.2031
  DV=-2.58E-04
  PAUX=PA/6894.76
  VESP=(AV/(PAUX+BV)+CV+DV*PAUX)/16.0185
  RO=1./VESP
  GO TO 4
3 CONTINUE
  RO=PA*18.015/(8314.2*TA)
4 CONTINUE
  IF(TA.GT.2000.) TA=2000.
C
  CP=(8.10-0.72E-03*TA+3.63E-06*TA*TA-1.16E-09*TA**3)*232.34
C
  CT=(17.53-2.42E-02*TA+4.3E-04*TA*TA-21.73E-08*TA**3)*4.1868E-04
C
  VI=(-31.98+41.45E-02*TA-8.272E-06*TA*TA)*1.0E-07
C
2 CONTINUE
  PR=CP*VI/CT
C
  RETURN
  END

```

E-18 SUBROTINA DE CÁLCULO DA PRESSÃO DE VAPOR D'ÁGUA.

```

SUBROUTINE PVAGUA(T,P,PV)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C

```

```

C  CALCULA A PRESSAO DE VAPOR DA AGUA
C
C  NOTACAO :
C
C  T          = TEMPERATURA          (K)
C  P          = PRESSAO LOCAL        (PA)
C  PV         = PRESSAO DE VAPOR     (PA)
C
C  TA=T
C  PV=P
C  IF(TA.LT.273.) TA=273.
C  IF(TA.GT.647.35) GO TO 1
C  CALL TBAGUA(P,TS,HV)
C  IF(TA.GE.TS) GO TO 1
C  AUXPV = 16.373-2818.6/TA-1.6908*ALOG10(TA)-5.7546E-03*TA+
C  * 4.0073E-06*TA*TA
C  PV= 133.3224*10.0**AUXPV
1 CONTINUE
C  RETURN
C  END

```

E-19 SUBROTINA DE CÁLCULO DA TEMPERATURA DE SATURAÇÃO D'ÁGUA.

```

SUBROUTINE TBAGUA(P,TS,HV)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C
C
C  CALCULA A TEMPERATURA DE SATURACAO DA AGUA, DADA A PRESSAO
C
C  NOTACAO :
C
C  P          = PRESSAO              (PA)
C  TS         = TEMPERATURA DE SATURACAO DA AGUA A P  (K)
C  HV         = ENTALPIA DE VAPORIZACAO              (J/KG)
C
C  A=8576.65
C  B=15.47538
C  C=-459.216
C  D=-0.023719
C  E=0.84219E-04
C  F=-0.70854E-07
C  PA = P/6894.76
C  TA= A/(B-ALOG(PA))+C+D*PA+E*PA*PA+F*PA**3
C
C  TS= (TA+459.67)*5./9.
C
C  HV1=2257.0E+03
C  TCH2O=647.35
C  T1=373.15
C  POR=0.38

```

```
HV=HV1*((TCH2O-TS)/(TCH2O-T1))*POR  
RETURN  
END
```

E-20 SUBROTINA DE CÁLCULO DAS DIFERENCIAIS EM Z DAS DESCARGAS DE COMPONENTES E TEMPERATURAS.

```

SUBROUTINE FCN(NEQD,Z,F,DF)
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C
C AS EQUACOES DIFERENCIAIS SAO DEFINIDAS PARA 12 COMPONENTES
C GASOSOS, 6 COMPONENTES SOLIDOS, 1 TEMPERATURA DO SOLIDO 1
C TEMPERATURA DO GAS E 1 DERIVADA DE TEMPERATURA
C
C   VALIDO NA REGIAO DE COMBUSTAO E GASEIFICACAO
C
  DIMENSION F(23),DF(23)
  COMMON/ALCATR/ALC(18)
  COMMON/DAD/UMIDAD,VOLAT,CARFIX,CINZAS,PCSMT,FMMT,ARMT,VPMT,
  1TMT,TAR,TVP,POPER,DL,ZL,DIAMPT,ITIPO,IFORM,MODELQ,XO2CB,DLZ(10)
  COMMON/BD/AMW(19)
  COMMON/CCCC03/FNAR,FNVP,XN2CB,QNSEN,HVH2O,AMGRS,AMGRI,AMGRE
  COMMON/DD/H(19),CP(19)
  COMMON/CRRRRR/CR(19,14)
  COMMON/VVVVVV/FMTV,FNTV,AV(13),DEV(18),FNV(13),FMV(13),XV,WV
  COMMON/VVVVV1/YV(13)
  COMMON/SECCCC/TASEC,ZASEC,JAPPS,HVSEC
  COMMON/DDDD/AICP(19),CPG,AICPTS(19),AICPTG(19)
  COMMON/QQ/TEXT,VV,EPS,XIS,KIS
  COMMON/DAD1/WCBS,WHBS,WOBBS,WNBS,WSBS,WZBS
  COMMON/DAD2/WC,WH,WO,WN,WS,WZ
  COMMON/OUT/FMAR,FMVP
  COMMON/ABC/HF298(13)
  COMMON/SSS/Y(19),WG(13),AMMG,FNG,FMS
  COMMON/RRR/ROMAT,ROCINZ,VPORM,EL,EP,ROGB,ROREAL,JAFCMC,
  * VPORZ,X0CFX,X0VOL
  COMMON/GEOCAM/DIANU,DEANU,ATANU,DEQANU
  COMMON/PARRR3/HR(18)
  COMMON/PARRR4/AREA,TS,TG,PID,FQEX,HTPERD,AEXDZ,QEX,TSH2O,TASECG
  *,AREAZ0,AREAZL
  COMMON/PARRR5/PI,R,CPS,DP,ROP,DZ,P,HGG,HSS,HTCSG,HTMSG,TEXP,TEBAC
  COMMON/PARRR6/HG(19),HTMGS
  COMMON/PARRR7/C,HI,O,AN,S,CINZ,CETM,HIETM,OETM,ANETM,SETM,ZETM,XC
  *,UMIETM,FAUXDP,ZLEITO
  COMMON/PARRR8/DFDZ(23)
  COMMON/QQQCAM/HCAM,EANU,ESCHG,CTCHG,EMISPI,FMAC,TETAC,PRECAM
  COMMON/CCCAM/TAC,TPIG,QCAMZ,FQCAMZ,IEB,HISOL
  COMMON/RCINNN/RRN(14)
  COMMON /VINI/EMS,FCRAD
  COMMON/RADI/RADI
  DATA SIGMA,HP/5.6688E-08,1.9874E+5/
C
  TS=F(20)
  TG=F(21)

```

```

DO 33 K=1,14
33 RRN(K)=0.
ZLEITO=Z
FNG=0.0
DO 21 K=1,13
IF(F(K).LT.0.) F(K)=0.
21 FNG=FNG+F(K)
DO 26 K=1,13
26 Y(K)=F(K)/FNG
FMS=0.0
DO 22 K=14,19
22 FMS=FMS+F(K)
TESTD=F(14)
DO 27 K=14,19
27 Y(K)=F(K)/FMS
CALL XPARAW(Y,WG,AMMG)
C
CPG=0.
CPS=0.
DO 25 M=1,19
H(M)=0.
HG(M)=0.
CALL CPH(M,TS,CP(M),H(M),AICPTS(M))
IF(M.GE.14) CPS=CPS+CP(M)/AMW(M)*Y(M)
IF(M.GE.14) GO TO 25
CALL CPH(M,TG,CP(M),HG(M),AICPTG(M))
CPG=CPG+CP(M)*Y(M)
25 CONTINUE
C
C CALCULO DAPDZ E COEF.TRANSF. CALOR
C
PARAVC=FAUXDP/(FAUXDP+(1.-FAUXDP)*ROMAT*CINZAS/(100.*ROCINZ))
IF(IFORM.EQ.1) DAPDZ=PI*(1.-EL)*1.5*DL**2/DP
IF(IFORM.EQ.2) DAPDZ=PI*(1.-EL)*DL**2/DP
IF(IFORM.EQ.3) DAPDZ=PI*(1.-EL)*0.5*DL**2/DP
CALL VISCQ(TG,Y,VIGM,AMG)
CPGM=CPG/AMG
CALL CONDTG(TG,CTGM)
PSITC=1.0
IF(IFORM.EQ.2) PSITC=0.91
IF(IFORM.EQ.3) PSITC=0.86
FMG=FNG*AMG
GMG=FMG/AREA
ATC=DAPDZ/AREA
RE=GMG/(ATC*VIGM*PSITC)
BTC=ATC*DP*PSITC**2
PR=CPGM*VIGM/CTGM
IF(RE.GT.50.) GO TO 66
NU=0.91*BTC*RE**0.49*PR**(1./3.)
GO TO 67
66 CONTINUE
NU=0.61*BTC*RE**0.59*PR**(1./3.)
67 CONTINUE
CTTSG=NU*CTGM/DP
68 CONTINUE
C
C CALCULO X0CFX

```

```

C
  X0CFX=ROMAT*CARFIX/100./AMW(14)
C
C  CHAMADA SUBROTINA CINET
C
  NCPIROL=0
  CALL CINET(NCPIROL)
C
C  CALCULO DE DTSTG PARA OBTENCAO DE HTCSCG
C
  DTSTG=TS-F(21)
C
C  CALCULO DOS COEFICIENTES ESTEQUIOMETRICOS DAS VARIAS REACOES
C
  CALL ESTEQ(TS,CR)
C
C  BALANCO DE MASSA
C
  DO 10 K=1,19
    DF(K)=0.
    DO 11 I=1,14
      SUP=AREA
      IF(I.EQ.12.OR.I.EQ.14.OR.I.EQ.1.OR.I.EQ.2.OR.I.EQ.6.
*OR.I.EQ.7.AND.IFORM.EQ.3) SUP=DAPDZ*PARAVC
      IF(IFORM.EQ.1.AND.I.EQ.12.OR.I.EQ.14) SUP=DAPDZ*PARAVC
      DF(K)=DF(K)+SUP*CR(K,I)*RRN(I)
11 CONTINUE
      IF(K.GE.14) DF(K)=-DF(K)*AMW(K)
10 CONTINUE
C
C  CALCULO DE ENTALPIAS DE REACOES
C
  HSS=0.
  HGG=0.
  HTMSG=0.
  HTMGS=0.
  DO 12 I=1,14
    SUP=AREA
    IF(I.EQ.12.OR.I.EQ.14.OR.I.EQ.1.OR.I.EQ.2.OR.I.EQ.6.
*OR.I.EQ.7.AND.IFORM.EQ.3) SUP=DAPDZ*PARAVC
    HR(I)=0.
    DO 13 K=1,19
      IF(I.EQ.1.OR.I.EQ.2.OR.I.EQ.6.OR.I.EQ.7.OR.I.EQ.12.OR.I.EQ.14
*) GO TO 14
      HR(I)=HR(I)+CR(K,I)*HG(K)
    ISG=2
    IF(I.EQ.13) HR(I)=0.00000
    GO TO 13
14 CONTINUE
    HR(I)=HR(I)+CR(K,I)*(H(K)-AICPTS(K))
    IF(CR(K,I).GT.0..OR.K.GT.13) HTMSG=HTMSG+CR(K,I)*AICPTS(K)*
*RRN(I)*SUP
    IF(CR(K,I).LT.0..AND.K.LE.13) HTMSG=HTMSG+CR(K,I)*AICPTG(K)*
*RRN(I)*SUP
    IF(K.LE.13.AND.CR(K,I).GT.0.) HTMGS=HTMGS+CR(K,I)*RRN(I)*
*SUP*(AICPTS(I)-AICPTG(I))
    ISG=1
    IF(I.EQ.12) HR(I)=HP*AMW(13)
    IF(I.EQ.14) HR(I)=HVSEC*AMW(9)

```

```

13 CONTINUE
C
C CALCULO ENTALPIAS DE REACAO HGG E HSS
C
  IF(ISG.EQ.2) HGG=HGG+HR(I)*RRN(I)*SUP
  IF(ISG.EQ.1) HSS=HSS+HR(I)*RRN(I)*SUP
12 CONTINUE
C
C CALCULO DO CALOR TROCADO POR CONVECCAO ENTRE AS FASES SOLIDA E GASOSA
C
  HTCSCG=DAPDZ*CTTSG*DTSTG
C
  AEXDZ=PID*DZ
C
C CALCULO DO CALOR TROCADO COM O MEIO E COM A CAMISA DE REFRIGERAÇÃO-
C
C
  IF((HCAM.EQ.0.0).OR.(Z.GT.HCAM)) GO TO 70
C
C CALCULO DO CALOR TROCADO COM A CAMISA DE REFRIGERACAO
C
  CALL QCAMRE(Z,TAC,TPICAM,CTTCAM,FQCAMZ,QCAMZ,IEB)
  FQEX= FQCAMZ
  QEX = QCAMZ
  TEXP= TAC
  TPIG=TPICAM
  GO TO 71
70 CONTINUE
C
  IF(HISOL.LE.0.0) GO TO 71
C
C CALCULO DO CALOR TROCADO ENTRE O GASEIFICADOR E O MEIO NA
C PARTE COM ISOLAMENTO
C
  IF((XIS.EQ.0.).OR.(KIS.EQ.0.)) GO TO 71
  CALL QEXRC(TG,AEXDZ,QEX,TEXP,CTTEX,CTTIS,FQEX)
  TPIG=TG
71 CONTINUE
C
  HTPERD=-FQEX*AREA*4./DL
C
  SENS=-CPS*FMS
C
C CALCULO CONDUTIVIDADE TERMICA DIRECAO Z (DEVIDO RADIACAO)
C
  RADI=4.*(EMS/(2.-EMS))*SIGMA*DIAMPT*TS**3
C
C CONDUTIVIDADE CARVAO (W/M*K)
C
  AKC=0.22
C
C CALCULO DE DF(20) E DF(21) E DF(23)
C
  PRODUTO=F(23)*SENS
  AREACOND=AREA*((1-EL)*AKC+RADI)
  DF(20)=F(23)
  DF(21)=(-HGG+HTCSG+HTMGS-HTPERD)/(CPG*FNG)
  DF(23)=(PRODUTO+HTMSG+HTCSG+HSS)/AREACOND
  ERADI=-DF(23)*AREACOND

```

```

C
DO 81 I=1,23
  DFDZ(I)=DF(I)
81 CONTINUE
C
  RETURN
END

```

E-21 FUNÇÃO DE CÁLCULO DO PARÂMETRO DE CONVERGÊNCIA DO PROGRAMA NAS REGIÕES DE COMBUSTÃO E GASEIFICAÇÃO.

```

FUNCTION DCCONV(XCT)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
EXTERNAL FCN,FCNJ,DTCONV
REAL KIS
INTEGER IWK(23)
DIMENSION F(23)
DIMENSION DTEXP(1000),DQEX(1000),DQEXT(1000),Y1(1000)
DIMENSION YX4(1000,10),AYX(1000,12)
DIMENSION YX6(1000,7),YT(1000,20)
DIMENSION YX(1000,19),CS(1000,24)
DIMENSION FRI(21),XGRI(21),WGRI(21),FRS(21),FRE(21)
DIMENSION XGRS(13),WGRS(13),XGRE(13)
DIMENSION DF(23)
DIMENSION RRN(14),DFDZ(23),WK(358)
COMMON/CCCC01/DTEXP,DQEX,DQEXT,YX4,YX6,YX,YT,Y1,CS,AYX
COMMON/CCCC02/DF,FRS,FRI,FRE,WGRS,WGRI,XGRS,XGRI,XGRE
COMMON/CCCC03/FNAR,FNVP,XN2CB,QNSEN,HVH2O,AMGRS,AMGRI,AMGRE
COMMON/CCCC04/CPGRS,CPGRI,CPGRE,TGRS,TGRI,TGRE,TGCRS,TGCRI,TGCRE
COMMON/CCCC05/FNGRS,FNGRI,FNGRE,FMGRS,FMGRI,FMGRE,FMRZ
COMMON/CCCC06/J,TENTG,QEXT,TSMAX,ZTSMAX,JTMAX,FMHIE,FRZ(21)
COMMON/FF/F
COMMON/DD/H(19),CP(19)
COMMON/DDDD/AICP(19),CPG,AICPTS(19),AICPTG(19)
COMMON/CRRRRR/CR(19,14)
COMMON/VVVVVV/FMTV,FNTV,AV(13),DEV(18),FNV(13),FMV(13),XV,WV
COMMON/VVVVV1/YV(13)
COMMON/ALCATR/ALC(18)
COMMON/BD/AMW(19)
COMMON/DAD/UMIDAD,VOLAT,CARFIX,CINZAS,PCSM,T,FMMT,ARMT,VPMT,
1TMT,TAR,TVP,POPER,DL,ZL,DIAMPT,ITIPO,IFORM,MODELQ,XO2CB,DLZ(10)
COMMON/DAD2/WC,WH,WO,WN,WS,WZ
COMMON/DAD1/WCBS,WHBS,WOBS,WNBS,WSBS,WZBS
COMMON/OUT/FMAR,FMVP
COMMON/ABC/HF298(13)
COMMON/CIM/IMPRI
COMMON/FRRECC/IREC,ZRS,FATRS,ZRI,FATRI,ZREE
COMMON/QQ/TEXT,VV,EPS,XIS,KIS
COMMON/SSS/Y(19),WG(13),AMMG,FNG,FMS
COMMON/RRR/ROMAT,ROCINZ,VPORM,EL,EP,ROGB,ROREAL,JAFCMC,
* VPORZ,X0CFX,X0VOL

```

```

COMMON/QQQCAM/HCAM,EANU,ESCHG,CTCHG,EMISPI,FMAC,TETAC,PRECAM
COMMON/SECCCC/TASEC,ZASEC,JAPPS,HVSEC
COMMON/GEOCAM/DIANU,DEANU,ATANU,DEQANU
COMMON/PARRR3/HR(18)
COMMON/PARRR4/AREA,TS,TG,PID,FQEX,HTPERD,AEXDZ,QEX,TSH2O,TASECG
* ,AREAZ0,AREAZL
COMMON/PARRR5/PI,R,CPS,DP,ROP,DZ,P,HGG,HSS,HTCSG,HTMSG,TEXP,TEBAC
COMMON/PARRR6/HG(19),HTMGS
COMMON/PARRR7/C,HI,O,AN,S,CINZ,CETM,HIETM,OETM,ANETM,SETM,ZETM,XC
* ,UMIETM,FAUXDP,ZLEITO
COMMON/PARRR8/DFDZ
COMMON/RCINNN/RRN
COMMON/CCCAM/TAC,TPIG,QCAMZ,FQCAMZ,IEB,HISOL
COMMON/APRRRR/APR(3,18)
COMMON/FRTCZ1/TMAXPS,tminps
COMMON /VINI/EMS,FCRAD
COMMON/DTSDZ/DTSI,IZ,IY
COMMON/PIR/FCON14
COMMON/RADI/RADI
COMMON/ZPIR/Z,TGFGAS
C
CLTEMP=0.1
CALL RCTEMP(DTCONV,XCT,TEMPCZ,TMAXPS,TMINPS,CLTEMP)
C
C   COMPUTA AR ARRASTADO JUNTO COM O MATERIAL PARA DENTRO
C   DO GASEIFICADOR
C
CNTMT=P/(R*TMT)
FV0=FMMT/ROGB
FN0AR=CNMT*FV0*EL
FN0N2=FN0AR*0.79
FN0O2=FN0AR-FN0N2
C
C
C   ESTABELECE VALORES INICIAIS PARA A INTEGRACAO DO SISTEMA
C   DE EQUACOES DIFERENCIAIS
C
C
DO 106 I=1,14
  RRN(I)=0.
106 CONTINUE
FCON14=1.0
FCON22=1.0
FAUXDP=0.
C
DO 107 K=1,23
  FRI(K)=0.
  DFDZ(K)=0.
107 CONTINUE
QCAMZ=0.
C
IF(TEMPCZ.LT.TENTG) TEMPCZ=TENTG
JAATCZ=0
XC=XCT
C
WRITE(6,1111)XCT
1111 FORMAT(/,2X,'XCTEST=',E12.5,/)
C
84 CONTINUE

```

```

F(1)=0.
F(2)=0.
F(3)=FNAR*XN2CB
F(4)=0.
F(5)=0.
F(6)=0.
F(7)=0.
F(8)=FNAR*XO2CB
F(9)=FNVP
F(10)=0.
F(11)=0.
F(12)=0.
F(13)=0.
F(14)=C*(1.-XC)
F14ZER=F(14)
F(15)=HI*(1.-XC)
F(16)=O*(1.-XC)
F(17)=AN*(1.-XC)
F(18)=S*(1.-XC)
F(19)=CINZ
F(20)=TEMPCZ
F(21)=TENTG
F(22)=0.
F(23)=DTSI
DO 70 K=1,21
FRZ(K)=F(K)
70 CONTINUE
QEXT=0.0
QCAM=0.0
TAC=TETAC
JAPPRI=0
JAPPRS=0
JAAREC=0
JAPPS=0
ICOEFV=0
Z=0.0
J=1
TS=F(20)
TG=F(21)
TSMAX=TEMPCZ-273.15
ZTSMAX=0.
JTMAX=1
FNG= 0.0
DO 53 M=1,13
53 FNG=FNG+F(M)
FMRZ=0.
DO 158 M=14,19
FMRZ=FMRZ+F(M)
158 CONTINUE
Y1(J)=Z/ZL
YT(J,1)=TS-273.15
YT(J,2)=TG-273.15
DO 2021 K=1,13
2021 YX(J,K)=F(K)/FNG
DO 2022 K=1,12
2022 AYX(J,K)=YX(J,K)/(1.-YX(J,9)-YX(J,13))
DO 130 K=14,19
130 YX(J,K)=F(K)/FMRZ

```

C

```

DO 10 KK=1,10
YX4(J,KK)=RRN(KK)*1.0E+09
IF(YX4(J,KK).LT.1.) YX4(J,KK)=1.
YX4(J,KK)=ALOG10(YX4(J,KK))
K=KK+10
IF(K.GT.14) GO TO 10
YX6(J,KK)=RRN(K)*1.0E+09
IF(YX6(J,KK).LT.1.) YX6(J,KK)=1.
YX6(J,KK)=ALOG10(YX6(J,KK))
10 CONTINUE
DO 55 KK=1,23
55 CS(J,KK)=F(KK)
C
DO 65 I=1,13
IF(F(I).LE.0.) F(I)=0.
65 CONTINUE
y(8)=f(8)/fng
RADI=0.
C
C INICIO INTEGRACAO DO SISTEMA DE EQUACOES DIFERENCIAIS
C
20 CONTINUE
J=J+1
DZ=1.0E-6
C
C AQUI E CHAMADA A SUBROTINA PARA RESOLUCAO DO SISTEMA DE
C EQUACOES DIFERENCIAIS ACOPLADAS
C
C ESTIMA DENSIDADE E DIAMETRO DE PARTICULA
C
JAFCMC=0
IF(F(14).GE.C) JAFCMC=1
FAUXDP=(F(14)+F(15)+F(16)+F(17)+F(18))/(C+HI+O+AN+S)
IF(FAUXDP.GT.1.) FAUXDP=1.
PRINT 57,J,RADI,Z,TS,TG,fauxdp
57 FORMAT(/,1X,'J=',I5,1X,'RADI=',E12.5,1X,'Z=',E12.5,1X,'TS=',E12.5
*,1X,'TG=',E12.5,1X,'fauxdp=',e12.5)
IF(MODELQ.EQ.0.AND.JAFCMC.EQ.0.
*AND.IFORM.EQ.1) DP=DIAMPT*FAUXDP**(1./3.)
IF(MODELQ.EQ.0.AND.JAFCMC.EQ.0.
*AND.IFORM.EQ.2) DP=DIAMPT*FAUXDP**(1./2.)
IF(MODELQ.EQ.0.AND.JAFCMC.EQ.0.
*AND.IFORM.EQ.3) DP=DIAMPT*FAUXDP
IF(DP.LE.0.) DP=DIAMPT*1.0E-10
ROP=ROMAT
IF(MODELQ.EQ.1.OR.JAFCMC.EQ.1) ROP=ROMAT*FAUXDP+ROCINZ*(1.-FAUXDP)
C
NEQD=23
TOL=1.0E-05
METH=2
MITER=3
INDEX=1
PROXIZ=Z+ZL/1000.
IF(PROXIZ.GT.ZL) PROXIZ=ZL
IF(PROXIZ.NE.ZL) GO TO 90
F(3)=F(3)+FN0N2
F(8)=F(8)+FN0O2
90 CONTINUE

```

```

C      CALL DIAML(Z)
      AREA=PI*DL**2/4.
      AREAZ0=AREA
      AREAZL=AREA
      PID=PI*DL
C
C      IF(J.EQ.2) PROXIZ=2.*DZ
      DELZ=PROXIZ-Z
C
C      ROTINA DGEAR
C
      CALL DGEAR(NEQD,FCN,FCNJ,Z,DZ,F,PROXIZ,TOL,METH,MITER,INDEX,
*IWK,WK,IERGEA)
      IF(IERGEA.GT.128) GO TO 4999
      QEXT=QEXT+FQEX*PID*DELZ
      DQEX(J)=FQEX*PID*DELZ
      DQEXT(J)=QEXT
      DTEXP(J)=TEXP-273.15
      TG=F(21)
      TS=F(20)
C
C      VALORES SAO ESTOCADOS PARA PLOTAGEM DE GRAFICOS
C
      Y1(J)=Z/ZL
      YT(J,1)=TS-273.15
      YT(J,2)=TG-273.15
      IF(YT(J,1).LE.TSMAX) GO TO 40
      TSMAX=YT(J,1)
      ZTSMAX=Z
      JTMAX=J
40 CONTINUE
      DO 2018 K=1,12
      YX(J,K)=Y(K)
2018 AYX(J,K)=Y(K)/(1.-Y(9)-Y(13))
      DO 2019 K=13,19
2019 YX(J,K)=Y(K)
      DO 11 KK=1,10
      YX4(J,KK)=RRN(KK)
      K=KK+10
      IF(K.GT.14) GO TO 11
      YX6(J,KK)=RRN(K)
11 CONTINUE
      DO 39 KK =1,19
39 CS(J,KK)=F(KK)
      CS(J,20)=TG-273.15
      CS(J,21)=TS-273.15
      CS(J,22)=CS(J,21)
C
C      FIM DA REITERACAO
C
      IF(TS.GT.1073.) GO TO 20
C
C      COMPOSICAO DE GAS NA RETIRADA SUPERIOR
C
      DO 154 K=1,21
      FRS(K)=F(K)
154 CONTINUE
      FNGRS=0.

```

```

DO 155 K=1,13
  FNGRS=FNGRS+FRS(K)
  XGRS(K)=Y(K)
  WGRS(K)=WG(K)
155 CONTINUE
  TGRS=FRS(21)
  AMGRS=AMMG
  CPGRS=CPG/AMGRS
  FMGRS=FNGRS*AMGRS
153 CONTINUE
C
C  COMPARACAO ENTRE AS FRACOES DE CARBONO CONVERTIDO
C  ESTIMADA E CALCULADA AO FIM DA REGIAO DE GAS. E COMB.
C
  CSAI=(FRS(1)+FRS(2)+FRS(5)+FRS(6)*2.+FRI(1)+FRI(2)+FRI(5)+
*FRI(6)*2.+(FRS(13)+FRI(13))*ALC(14))*AMW(14)
  XCALT=CSAI/C
  ERR=(XCT-XCALT)/(XCT+XCALT)
C
  WRITE(6,1001) XCT,XCALT,XC,ERR,CSAI
1001 FORMAT(/,2X,'XCT=',E12.5,2X,'XCALT=',E12.5,2X,'XC=',E12.5,/,
* 2X,'ERR=',E12.5,2X,'CSAI=',E12.5,/)
C
C  CALCULO DE DCCONV
C
  DCCONV=XCT-XCALT
C
  WRITE(6,1002) DCCONV
1002 FORMAT(/,5X,'***** DCCONV=',E12.5,'*****',/)
C
  GO TO 4010
C
4999 CONTINUE
  PRINT 4998
4998 FORMAT(///,'OCORREU ALGUM ERRO NA INTEGRACAO DO SISTEMA DE EQU
*ACOES DIFERENCIAIS',/)
  WRITE(6,1003) NEQD,Z,DZ,PROXIZ,TOL
1003 FORMAT(2X,'NEQD=',I3,2X,'Z=',E12.5,2X,'DZ=',E12.5,/,
* 'PROXIZ=',E12.5,2X,'TOL=',E12.5,/)
  WRITE(6,1004) METH,MITER,INDEX,IERGEA
1004 FORMAT(2X,'METH=',I5,2X,'MITER=',I5,2X,'INDEX=',I5,/,
* 'IERGEA=',I5,/)
  PRINT* ,IWK,WK
  STOP
C
4010 CONTINUE
  RETURN
  END

```

E-22 FUNÇÃO DE CÁLCULO DO PARÂMETRO DE CONVERGÊNCIA NAS REGIÕES DE AQUECIMENTO, SECAGEM E PIRÓLISE.

```

FUNCTION DTGRS(TINI)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
EXTERNAL PIROL
COMMON/PRINT/JJJ,JFGAS
COMMON/PIRO1/ZP,TGP,TDP,TGF
COMMON/ZPIR/Z,TGFGAS
C
C  CHAMA A SUBROTINA PIROL
C
  JJJ=JFGAS
  TGF=TINI
C
  WRITE(6,10)Z,ZP,TINI,JJJ
10 FORMAT(/,2X,'CONVERGENCIA TEMPERATURA GAS RETIRADA SUPERIOR',/,
  12X,'Z=',E12.5,2X,'ZP=',E12.5,2X,'TGF=',E12.5,2X,'JJJ=',
  2I5,/)
C
  CALL PIROL (Z,ZP,TGF,TDP,JJJ)
C
  DTGRS=(TGFGAS-TGF)/TGFGAS
  WRITE(6,20)ZP,TGF,DTGRS
20 FORMAT(/,2X,'ZP=',E12.5,2X,'TGF=',E12.5,2X,
  1'DTGRS=',E12.5,/)
  RETURN
  END

```

E-23 SUBROTINA DE CÁLCULO DAS DESCARGAS DOS COMPONENTES DA MATÉRIA VOLÁTIL.

```

SUBROUTINE VOLATI
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C
DIMENSION AMAD(13),WVV(13)
C
COMMON/VVVVVV/FMTV,FNTV,AV(13),DEV(18),FNV(13),FMV(13),XV,WV
COMMON/DAD/UMIDAD,VOLAT,CARFIX,CINZAS,PCSMT,FMMT,ARMT,VPMT,
1TMT,TAR,TVP,POPER,DL,ZL,DIAMPT,ITIPO,IFORM,MODELQ,XO2CB,DLZ(10)
COMMON/DAD2/WC,WH,WO,WN,WS,WZ
COMMON/BD/AMW(19)
COMMON/ALCATR/ALC(18)
COMMON/CIM/IMPRI
COMMON/VVVVV1/YV(13)
COMMON/PIRO2/AMAD
COMMON/PIRO3/AMMV
C
DATA AMAD/8.3104E-02,1.0170E-01,0.0,4.032E-03,3.0464E-02,
* 4.4800E-03,2*0.0,2.8650E-01,3*0.0,2.035E-01/
DATA ALC/13*0.0,8.385,8.100,4.455,2*0.0/
C
DO 204 I=1,13
FNV(I)=0.
FMV(I)=0.
204 CONTINUE
DO 205 I=14,18
DEV(I)=0.
205 CONTINUE
FATDAF=1.-UMIDAD/100.-CINZAS/100.
FMMDAF=FMMT*FATDAF
VOLDAF=VOLAT/FATDAF
VZMVOL=FMMT*VOLAT/100.
XVM=VOLDAF/100.
C
C  CALCULA VAZOES MOLARES DOS GASES DE PIROLISE DE BIOMASSA
C
DO 3 I=1,13
FMV(I)=FMMDAF*AMAD(I)
3 CONTINUE
C
201 CONTINUE
DO 1 I=1,13
FNV(I)=FMV(I)/AMW(I)
1 CONTINUE
FMTV=0.
FNTV=0.
DO 202 I=1,13
FMTV=FMTV+FMV(I)

```

```

      FNTV=FNTV+FNV(I)
202 CONTINUE
      DO 206 I=1,13
      AV(I)=FNV(I)/FNTV
      YV(I)=AV(I)
206 CONTINUE
C
      AMMV=0.
      CALL XPARAW(AV,WVV,AMMV)
C
      DEV(14)=(FNV(1)+FNV(2)+FNV(5)+2.*FNV(6)+ALC(14)*FNV(13))*
* AMW(14)
      DEV(15)=(2.*FNV(4)+4.*FNV(5)+6.*FNV(6)+2.*FNV(7)+2.*FNV(9)+
* 3.*FNV(10)+FNV(13)*ALC(15))*AMW(15)
      DEV(16)=(FNV(1)+2.*FNV(2)+2.*FNV(8)+FNV(9)+FNV(11)+2.*FNV(12)
* + ALC(16)*FNV(13))*AMW(16)
      DEV(17)=(2.*FNV(3)+FNV(10)+FNV(11)+ALC(17)*FNV(13))*AMW(17)
      DEV(18)=(FNV(7)+FNV(12)+FNV(13)*ALC(18))*AMW(18)
      RETURN
      END

```

E-24 SUBROTINA DE LEITURA DE DADOS INICIAIS.

SUBROUTINE DADOS
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)

```

C
C      PROCESSA A LEITURA DOS DADOS EM UNIDADES DO SISTEMA INTERNACIO-
C      NAL
C
C      NOTACAO :
C
C      UMIDAD      = UMIDADE CONTIDA NO MATERIAL A SER PROCESSADO      (%)
C      VOLAT       = VOLATEIS CONTIDOS NO MATERIAL A PROCESSAR          (%)
C      CARFIX      = CARBONO FIXO CONTIDO NO MATERIAL A PROCESSAR        (%)
C      CINZAS      = CINZAS CONTIDAS NO MATERIAL A PROCESSAR            (%)
C      PCSMT       = PODER CALORIFICO SUPERIOR (BASE SECA) DO MATERIAL
C                      A PROCESSAR                                         (J/KG)
C      ITIPO       = INDICE REFERENTE AO TIPO DE MATERIAL ALIMENTADO
C                      (ITIPO=1 :CARVAO MINERAL ; 2 :CARVAO VEGETAL ;
C                      3 :MADEIRA)
C      IFORM       = INDICE REFERENTE A FORMA APROXIMADA DAS PARTICULAS
C                      ALIMENTADAS AO GASEIFICADOR (1 = ESFERICAS ;
C                      2 = CILINDICAS ; 3 = PLAQUETAS )
C      MODELQ      = MODELO ADOTADO DE CONSUMO DA PARTICULA
C                      (0 = SEM CAMADA DE CINZA EM TORNO DA PARTICULA
C                      1 = COM CAMADA DE CINZA EM TORNO DA PARTICULA )
C                      NO CASO DE MODELQ=0 ADMITE-SE QUE A CINZA SE
C                      DESPRENDE DA PARTICULA ; NO CASO DE MODELQ=1
C                      ADMITE-SE O MODELO DE NUCLEO NAO REAGIDO
C      WCBS        = FRACAO MASSICA DE CARBONO NO MAT. A PROCESSAR
C                      BASE SECA
C      WHBS        = FRACAO MASSICA DE HIDROGENIO NO MAT. A PROCESSAR

```

C		BASE SECA	
C	WOBS	= FRACAO MASSICA DE OXIGENIO NO MAT. A PROCESSAR	
C		BASE SECA	
C	WNBS	= FRACAO MASSICA DE NITROGENIO NO MAT. A PROCESSAR	
C		BASE SECA	
C	WSBS	= FRACAO MASSICA DE ENXOFRE NO MAT. A PROCESSAR	
C		BASE SECA	
C	WZBS	= FRACAO MASSICA DE CINZAS NO MAT. A PROCESSAR	
C		BASE SECA	
C	FMMT	= VAZAO MASSICA DE MATERIAL A PROCESSAR	(KG/S)
C	FMAR	= VAZAO MASSICA DE AR OU OXIGENIO INJETADO NO	
C		GASEIFICADOR	(KG/S)
C	FMVP	= VAZAO MASSICA DE VAPOR INJETADO NO GASEIFICADOR	
C			(KG/S)
C	TMT	= TEMPERATURA DO MATERIAL ALIMENTADO	(K)
C	TAR	= TEMPERATURA DO AR ALIMENTADO	(K)
C	TVP	= TEMPERATURA DO VAPOR ALIMENTADO	(K)
C	XO2CB	= FRACAO VOLUMETRICA (OU MOLAR) DE OXIGENIO	
C		NO COMBURENTE (SE AR : XO2CB=0.21)	
C	POPER	= PRESSAO DE OPERACAO DO GASEIFICADOR	(PA)
C	DLZ	= VETOR DIAMETRO INTERNO DO GASEIFICADOR	(M)
C	ZL	= ALTURA DA PARTE DO GASEIFICADOR CHEIA DE MATERIAL	
C			(M)
C	DIAMPT	= DIAMETRO MEDIO DE PARTICULA DENTRO DO LEITO	(M)
C	ROGB	= DENSIDADE APARENTE GLOBAL DE LEITO DE PARTICULAS	
C			(KG/M3)
C	ROMAT	= DENSIDADE APARENTE DO MATERIAL A PROCESSAR	(KG/M3)
C	ROREAL	= DENSIDADE REAL OU ESQUELETICA DE PARTICULA	(KG/M3)
C	TEXT	= TEMPERATURA DO AR AMBIENTE(EXTERNO)	(K)
C	VV	= VELOCIDADE MEDIA LOCAL DO VENTO	(M/S)
C	EPS	= EMISSIVIDADE DA PAREDE EXTERNA DO GASEIFICADOR	
C	XIS	= ESPESSURA DO ISOLAMENTO	(M)
C	KIS	= CONDUTIVIDADE TERMICA DO ISOLAMENTO	(W/M*K)
C	HCAM	= ALTURA DA CAMISA DE REFRIGERACAO	(M)
C	EANU	= ESPACO ANULAR DA CAMISA DE REFRIGERACAO	(M)
C	ESCHG	= ESPESSURA DA CHAPA ENTRE A CAMISA DE REFRIGERACAO	
C		E O GASEIFICADOR	(M)
C	FMAC	= VAZAO MASSICA DE AGUA PARA A CAMISA	(KG/S)
C	TETAC	= TEMPERATURA DE ENTRADA DA AGUA NA CAMISA	(K)
C	PRECAM	= PRESSAO NO INTERIOR DA CAMISA DE REFRIGERACAO(PA)	
C	EMISPI	= EMISSIVIDADE DA PAREDE INTERNA DO GASEIFICADOR	
C		(VALOR MEDIO)	
C	IREC	= FATOR DE RECICLO :(1=HA RECICLO ;0=NAO HA RECICLO)	
C	ZRS	= COTA DE RETIRADA SUPERIOR DE GASES	(M)
C	FATRS	= FATOR DE RETIRADA SUPERIOR (1.=TODO GAS PASSANDO	
C		PELA COTA ZRS E RETIRADO ; 0.=NADA E RETIRADO	
C	ZRI	= COTA DE RETIRADA INTERMEDIARIA DE GASES	(M)
C	FATRI	= FATOR DE RETIRADA INTERMEDIARIA DE GASES	
C		(1.=TODO O GAS E RETIRADO NA COTA ZRI;	
C		0.=NENHUMA RETIRADA INTERMEDIARIA E FEITA)	
C	ZREE	= COTA DO PONTO DE ADICAO DO RECICLO	(M)

```

C      DTSI      = ESTIMATIVA DA DERIVADA INICIAL DA TEMPERATURA DO SOLIDO
C      EM Z=0.

REAL KIS
CHARACTER*10 TITULO(16)
COMMON/BD/AMW(19)
COMMON/RRR/ROMAT,ROCINZ,VPORM,EL,EP,ROGB,ROREAL,JAFCMC,
* VPORZ,X0CFX,X0VOL
COMMON/DAD/UMIDAD,VOLAT,CARFIX,CINZAS,PCSMT,FMMT,ARMT,VPMT,
1TMT,TAR,TVP,POPER,DL,ZL,DIAMPT,ITIPO,IFORM,MODELQ,XO2CB,DLZ(10)
COMMON/DAD1/WCBS,WHBS,WOBS,WNBS,WSBS,WZBS
COMMON/DAD2/WC,WH,WO,WN,WS,WZ
COMMON/OUT/FMAR,FMVP
COMMON/QQ/TEXT,VV,EPS,XIS,KIS
COMMON/FRRECC/IREC,ZRS,FATRS,ZRI,FATRI,ZREE
COMMON/QQQCAM/HCAM,EANU,ESCHG,CTCHG,EMISPI,FMAC,TETAC,PRECAM
COMMON/ALCATR/ALC(18)
COMMON/VINI/EMS,FCRAD
COMMON/DTSDZ/DTSI
READ(5,101)(TITULO(JC),JC=1,16)
READ(5,*) UMIDAD,VOLAT,CARFIX,CINZAS,PCSMT,ITIPO,IFORM,MODELQ
READ(5,*) WCBS,WHBS,WOBS,WNBS,WSBS,WZBS
READ(5,*) FMMT,FMAR,FMVP,TMT,TAR,TVP,XO2CB
READ(5,*) IREC,ZRS,FATRS,ZRI,FATRI,ZREE
READ(5,*) POPER,ZL,DIAMPT,ROGB,ROMAT,ROREAL
READ(5,*) DLZ
READ(5,*) TEXT,VV,EPS,XIS,KIS
READ(5,*) HCAM,EANU,ESCHG,FMAC,TETAC,PRECAM,EMISPI
READ(5,*) DTSI,EMS,FCRAD
101 FORMAT(8A10,/,8A10)
WRITE(6,102)(TITULO(JC),JC=1,16)
102 FORMAT(1H1,////,8A10,/,8A10,/)
WRITE(6,11) UMIDAD,VOLAT,CARFIX,CINZAS,PCSMT
11 FORMAT( 5X,'DADOS BASICOS SOBRE O MATERIAL A SER PROCESSADO',/,
110X,' UMIDAD VOLAT CARFIX CINZAS PCSMT '
2,/,10X,5E12.5,/)
WRITE(6,12) WCBS,WHBS,WOBS,WNBS,WSBS,WZBS
12 FORMAT(/,10X,'COMPOSICAO DO CARVAO (BASE SECA)',/,10X,' W
1CBS WHBS WOBS WNBS WSBS WZBS ',
2,/,10X,6F12.5,/)
WRITE(6,13) FMMT,FMAR,FMVP,TMT,TVP,POPER,ZL,TAR
*,DIAMPT,ROGB,ROMAT,ROREAL,XO2CB,(DLZ(K),K=1,10)
13 FORMAT(/,10X,'OUTROS DADOS DE PROCESSO',/,/, FMMT
1FMAR FMVP TMT TVP POPER ZL
2 TAR ',/,8E12.5,/,5X,' DIAMPT ROGB
3 ROMAT ROREAL XO2CB',/,10X,
4 5E14.5,/,10X,'VETOR DIAMETRO DE LEITO',/,10X,10F10.3,/)
WRITE(6,16) IREC,ZRS,FATRS,ZRI,FATRI,ZREE
16 FORMAT(10X,' IREC ZRS FATRS ZRI FATRI
* ZREE',/,10X,16,5E12.5,/)
WRITE(6,77) DTSI,EMS,FCRAD
77 FORMAT(/,2X,'DERIVADA INICIAL=',E12.5,2X,'EMS=',E12.5,2X,
*'FCRAD=',E12.5)
WRITE(6,14) TEXT,VV,EPS,XIS,KIS
14 FORMAT( /,'DADOS PARA CALCULO DA TROCA DE CALOR ENTRE O GASEI
*FICADOR E MEIO AMBIENTE',/,10X,' TEXT VV EPS
1 XIS KIS ',/,10X,5E12.5,/)
WRITE(6,15) HCAM,EANU,ESCHG,FMAC,TETAC,PRECAM,EMISPI
15 FORMAT(1H1,/,',DADOS PARA CALCULO DA TROCA DE CALOR ENTRE O GA
1SEIFICADOR E A CAMISA DE REFRIGERACAO',/,10X,' HCAM EA

```

2NU ESCHG FMAC TETAC PRECAM EMISPI',
3//,7E12.5,/f)

```

C   ROCINZ=ROMAT*CINZAS/100.
C
C   NO CASO DE CINZA NAO ADERIDA · PARTICULA A DENSIDADE DE CINZA
C   SERA ADMITIDA IGUAL · DE SILICA
C
C   IF(MODELQ.EQ.0) ROCINZ=100.
C
C       CALCULO POROSIDADE LEITO E RESIDUO CARBONO
C
C   EL=1.-ROGB/ROMAT
C   EP=1.-ROMAT*CARFIX/ROREAL
C   VPORM=1./ROMAT-1./ROREAL
C
C   VPORZ=1./ROCINZ-1./ROREAL
C
C       CALCULO CONCENTRACAO MOLAR CARBONO EM CARBONO FIXO
C       E MATERIA VOLATIL EM BIOMASSA UMIDA
C
C   X0CFX=CARFIX*ROMAT/(100.*AMW(14))
C   X0VOL=VOLAT*ROMAT/(100.*AMW(13))
C
C       CALCULO DE FRACOES MASSICAS, BASE UMIDA, NO MATERIAL
C
C   WC=WCBS*(1.-UMIDAD/100.)
C   WH=WHBS*(1.-UMIDAD/100.)
C   WO=WOBS*(1.-UMIDAD/100.)
C   WN=WNBS*(1.-UMIDAD/100.)
C   WS=WSBS*(1.-UMIDAD/100.)
C   WZ=WZBS*(1.-UMIDAD/100.)
C
C       VAZOES MASSICAS DE AR E VAPOR (FMAR,FMVP) (KG/S)
C
C   ARMT = FMAR/FMMT
C   VPMT= FMVP/FMMT
C
C   RETURN
C   END

```



```

COMMON/BD/AMW(19)
COMMON/CCCC01/DTEXP,DQEX,DQEXT,YX4,YX6,YX,YT,Y1,CS,AYX
COMMON/CCCC02/DF,FRS,FRI,FRE,WGRS,WGRI,XGRS,XGRI,XGRE
COMMON/CCCC03/FNAR,FNVP,XN2CB,QNSEN,HVH2O,AMGRS,AMGRI,AMGRE
COMMON/CCCC04/CPGRS,CPGRI,CPGRE,TGRS,TGRI,TGRE,TGCRS,TGCRI,TGCRE
COMMON/CCCC05/FNGRS,FNGRI,FNGRE,FMGRS,FMGRI,FMGRE,FMRZ
COMMON/CCCC06/J,TENTG,QEXT,TSMAX,ZTSMAX,JTMAX,FMHIE,FRZ(21)
COMMON/DD/H(19),CP(19)
COMMON/CRRRRR/CR(19,14)
COMMON/VVVVVV/FMTV,FNTV,AV(13),DEV(18),FNV(13),FMV(13),XV,WV
COMMON/VVVVVV/YV(13)
COMMON/DDDD/AICP(19),CPG,AICPTS(19),AICPTG(19)
COMMON/QQ/TEXT,VV,EPS,XIS,KIS
COMMON/DAD1/WCBS,WHBS,WOBS,WNBS,WSBS,WZBS
COMMON/DAD2/WC,WH,WO,WN,WS,WZ
COMMON/ABC/HF298(13)
COMMON/FF/F(23)
COMMON/SSS/Y(19),WG(13),AMMG,FNG,FMS
COMMON/RRR/ROMAT,ROCINZ,VPORM,EL,EP,ROGB,ROREAL,JAFCMC,
* VPORZ,X0CFX,X0VOL
COMMON/GEOCAM/DIANU,DEANU,ATANU,DEQANU
COMMON/PARRR3/HR(18)
COMMON/PARRR4/AREA,TS,TG,PID,FQEX,HTPERD,AEXDZ,QEX,TSH2O,TASECG
* ,AREAZ0,AREAZL
COMMON/PARRR5/PI,R,CPS,DP,ROP,DZ,P,HGG,HSS,HTCSG,HTMSG,TEXP,TEBAC
COMMON/PARRR6/HG(19),HTMGS
COMMON/PARRR7/C,HI,O,AN,S,CINZ,CETM,HIETM,OETM,ANETM,SETM,ZETM,XC
* ,UMIETM,FAUXDP,ZLEITO
COMMON/PARRR8/DFDZ(23)
COMMON/QQQCAM/HCAM,EANU,ESCHG,CTCHG,EMISPI,FMAC,TETAC,PRECAM
COMMON/CCCAM/TAC,TPIG,QCAMZ,FQCAMZ,IEB,HISOL
COMMON/RCINNN/RRN(14)
COMMON/PIRO2/AMAD
COMMON/PIRO3/AMMV
COMMON/PIRO4/PMGRS
COMMON/UMIDO/VMUMID,UMBU

```

```

C
C DEFINICAO DE DIFERENCIAIS DE COMPRIMENTO
C

```

```

DZP=(ZL-Z)/FLOAT(IZ-1)
DY=DP/2./FLOAT(IY-1)
PRINT 800,DZP,DY
WRITE(6,800)DZP,DY
800 FORMAT(/,2X,'PASSOS DE INTEGRACAO',/,2X,
*'DZP=',E15.10,5X,'DY=',E15.10,/)

```

```

C
C TEMPERATURA DE REFERENCIA PARA CALCULO DE ENTALPIAS
C

```

```
T0=273.
```

```

C
C ENERGIA DE ATIVACAO DE REACAO DE PIROLISE SOBRE R
C

```

```
ESRPIR=13555.0
```

```

C
C CONSTANTE DE REACAO DE PIROLISE (1/S)
C

```

```
AK0=4.125E6
```

```

C
C CALCULO VELOCIDADE DESCIDA MATERIAL SOLIDO (M/S)

```

```

C
C  VZ=FMMT/AREA/ROGB
C
C  RAIO DE PARTICULA RP (M)
C
C  RP=DP/2.
C
C  CALCULO DENSIDADE MATERIA VOLATIL NO MATERIAL ALIMENTADO (ROV)(KG/M3)
C
C  ROV=ROMAT*(1.-UMIDAD/100.-CINZAS/100.)*0.709803
C
C  CALCULO DENSIDADE MADEIRA SECA (ROMADS) (KG/M3)
C
C  ROMADS=ROMAT*(1.-UMIDAD/100.)
C
C  CALCULO DENSIDADE UMIDADE (KG/M3)
C
C  ROUMID=ROMAT*UMIDAD/100.
C
C  CALCULO DENSIDADE CARVAO (ROC) (KG/M3)
C
C  ROC=ROMADS-ROV
C
C  CALOR ESPECIFICO MADEIRA SECA (J/(KG.K))
C
C  CEMS=2500.
C
C  CALOR ESPECIFICO GAS DE PIROLISE (J/(KG.K)):FIGUEIREDO
C
C  CEGP=1200.
C
C  CALOR ESPECIFICO CARVAO (J/(KG.K)):FIGUEIREDO
C
C  CEC=1350.
C
C  CALOR ESPECIFICO DE AGUA LIQUIDA(J/(KG.K))
C
C  CEAG=4186.0
C
C  CONDUTIVIDADE DE MADEIRA SECA (W/(M.K))
C
C  CONDMS=0.166
C
C  CONDUTIVIDADE DE CARVAO (W/(M.K))
C
C  CONDC=0.2205
C
C  ENTALPIA DE REACAO DE PIROLISE (J/KG)
C
C  HP=1.9874E+5
C
C  CALCULO UMIDADE BASE SECA MATERIAL ALIMENTADO (UMAT)
C
C  UMAT=UMIDAD/(100.-UMIDAD)
C
C  CALCULO VAZAO MOLAR UMIDADE (MOL/S)
C
C  FNUMID=FMMT*UMIDAD/100./AMW(9)
C

```

C CALCULO TEMPERATURA SATURACAO UMIDADE BIOMASSA (K)

```
C
DO 555 IN=1,IY
  TSAT(IN)=1./(2.13E-3+2.778E-4*ALOG(UMAT*100.)+
    * 9.997E-6*(ALOG(UMAT*100.))**2.
    * -1.461E-5*(ALOG(UMAT*100.))**3.)
  IF(UMAT.GT.0.144) TSAT(IN)=373.
555  CONTINUE
```

C
C CALCULO DAPDZ (M2 SUPERFICIE DE PARTICULA/M DE REATOR)

```
C
DAPDZ=(1.-EL)*PI*DL**2/4./RP
```

C
C CALCULO CALOR ESPECIFICO MADEIRA UMIDA (J/(KG.K))

```
C
DO 5 N=1,IY
  CPSP(N)=(ROUMID*CEAG+ROMADS*CEMS)/ROMAT
5  CONTINUE
```

C
C CALCULO COMPOSICAO GAS DE DECOMPOSICAO DE ALCATRAO
C (FRACAO MASSICA - AMAD2(J))

```
C
SOMA=0.
DO 7 IV=1,12
  SOMA=SOMA+AMAD(IV)
7  CONTINUE
DO 9 JA=1,12
  AMAD2(JA)=AMAD(JA)/SOMA
9  CONTINUE
```

C
C IMPRESSAO DE PARAMETROS ADOTADOS E CALCULADOS

```
C
WRITE(6,200) VZ,FMMT,FMS,FNG,TS,TGE,ROV,ROMADS,ROC,
  *ROUMID,UMAT,FNUMID,FMG
200 FORMAT(/,2X,'VZ=',E12.5,
  *,2X,'FMMT=',E12.5,2X,'FMS=',E12.5,2X,'FNG=',E12.5,
  *,2X,'TS=',E12.5,2X,'TGE=',E12.5,/,2X,'ROV=',E12.5,2X,
  *,2X,'ROMADS=',E12.5,2X,'ROC=',E12.5,2X,'ROUMID=',E12.5,/,
  *,2X,'UMAT=',E12.5,/,2X,'FNUMID=',E12.5,2X,'FMG=',E12.5)
```

C
C DEFINICAO DAS VARIAVEIS DEPENDENTES NO INICIO
C DA REGIAO DE PIROLISE

```
C
DO 10 I=1,IY
  TSP(1,I)=TMT
  ROVOL(1,I)=ROV
  ROVOL(2,I)=ROV
  ROMS(1,I)=ROMAT
  ROMS(2,I)=ROMAT
  FMSP(1,I)=ROMS(1,I)*VZ
  FMSP(2,I)=FMSP(1,I)
  FMGP(I)=0.
  FMVS(I)=0.
  JCP(I)=0
  JCS(I)=0
  UM(1,I)=UMAT
  UM(2,I)=UMAT
  CONDS(I)=0.
  HLV(I)=0.
```

```

10 CONTINUE
  DO 11 K=1,19
    FNVP(K)=0.
    FP(K)=0.
11 CONTINUE
  DO 16 K=1,14
    RRN(K)=0.
16 CONTINUE
  TSP(1,0)=TMT
  TSP(1,IY)=TMT
  TSP(2,IY)=TMT
  ZP=0.
  F(13)=0.
  DO 31 K=1,13
    FNVP(K)=FNV(K)
    IF(K.EQ.13)FNVP(13)=FMV(13)/AMW(13)
    FP(K)=F(K)+FNVP(K)
    IF(K.EQ.9) FP(K)=FP(K)+FNUMID
31 CONTINUE
  FP(14)=CETM
  FP(15)=HIETM
  FP(16)=OETM
  FP(17)=ANETM
  FP(18)=SETM
  FP(19)=ZETM
  DO 32 K=1,19
    PRINT 2,K,F(K),FP(K),FNVP(K)
    WRITE(6,2) K,F(K),FP(K),FNVP(K)
32 CONTINUE
  WRITE(6,69) FNUMID,TG
69 FORMAT(/,4X,'FNUMID=',E12.5,2X,'TG=',E12.5,/)
2 FORMAT(/,2X,I2,2X,'F(K)=',E12.5,2X,'FP(K)=',E12.5,2X,
  *'FNVP(K)=',E12.5)
  FQEX=0.
C
C CALCULO FRACOES MOLARES NO TOPO GASEIFICADOR NA FASE GASOSA
C E MASSICAS NA FASE SOLIDA
C
  FNG=0.0
  FMSPG=0.
  DO 321 K=1,13
321 FNG=FNG+FP(K)
  DO 421 K=14,19
421 FMSPG=FMSPG+FP(K)
  DO 326 K=1,13
    Y(K)=FP(K)/FNG
    PRINT*,K,'Y(K)=',Y(K),' FP(K)=',FP(K)
326 CONTINUE
  DO 426 K=14,19
    Y(K)=FP(K)/FMSPG
    PRINT*,K,'Y(K)=',Y(K),' FP(K)=',FP(K)
426 CONTINUE
  CALL XPARAW(Y,WG,AMMG)
C
  CPG=0.
  DO 525 M=1,13
    H(M)=0.
    HG(M)=0.
    CALL CPH(M,TGE,CP(M),HG(M),AICPTG(M))

```

```

      CPG=CPG+CP(M)*Y(M)
525 CONTINUE
C
C   A CORRENTE DE RETIRADA SUPERIOR NAO FOI COMPUTADA ATE AQUI
C   ENTAO ESSA COMPUTACAO SERA FEITA AGORA
C
      DO 154 K=1,19
      FRS(K)=FP(K)
154 CONTINUE
      FNGRS=0.
      DO 155 K=1,13
      FNGRS=FNGRS+FRS(K)
      XGRS(K)=Y(K)
      WGRS(K)=WG(K)
155 CONTINUE
      TGRS=TGE
      AMGRS=AMMG
      PMGRS=AMMG
      CPGRS=CPG/AMGRS
      FMGRS=FNGRS*AMGRS
      WRITE(6,801)AMGRS,FNGRS,FMGRS,CPGRS
801 FORMAT(/,'***** TESTE AMGRS*****',/,
      12X,'AMGRS=',E12.5,2X,'FNGRS=',E12.5,2X,'FMGRS=',E12.5,
      22X,'CPGRS=',E12.5,/)
C
C   INICIO ROTINA DE INTEGRACAO AO LONGO DE Z
C
      MIMP=0
      DO 30 M=1,IZ
      TG=TGE
      TS=(TSP(1,1)+TSP(1,IY))/2.
      FMS=0.
C
C   CALCULO DE VAZAO, COMPOSICAO MOLAR E TEMPERATURA FASE GASOSA
C
      PRINT 90,M,ZP,TGE
90 FORMAT(/,2X,'M=',I4,2X,'ZP=',E12.5,2X,'TGE=',E12.5,/)
      FNG=0.0
      FMSPG=0.
      DO 21 K=1,13
      FNG=FNG+FP(K)
      DO 41 K=14,19
      FMSPG=FMSPG+FP(K)
      DO 26 K=1,13
      Y(K)=FP(K)/FNG
      PRINT*,K,'Y(K)=',Y(K),' FP(K)=',FP(K)
26 CONTINUE
      DO 46 K=14,19
      Y(K)=FP(K)/FMSPG
      PRINT*,K,'Y(K)=',Y(K),' FP(K)=',FP(K)
46 CONTINUE
      PRINT*,FNG=,FNG,FMSPG=,FMSPG
      CALL XPARAW(Y,WG,AMMG)
C
C   CALCULO CALOR ESPECIFICO FASE GASOSA
C
      CPG=0.
      DO 25 K=1,13
      HG(K)=0.

```

```

      CALL CPH(K,TGE,CP(K),HG(K),AICPTG(K))
      CPG=CPG+CP(K)*Y(K)
25 CONTINUE
C
C  CALCULO VISCOSIDADE GAS EXTERNO · PARTICULA
C
      CALL VISCQ(TGE,Y,VIGM,AMG)
      CPGM=CPG/AMG
C
C  CALCULO CONDUTIVIDADE TERMICA FASE GASOSA
C
      CALL CONDTG(TGE,CTGM)
C
C  DEFINICAO FATOR DE FORMA DE PARTICULA
C
      PSITC=1.0
      IF(IFORM.EQ.2) PSITC=0.91
      IF(IFORM.EQ.3) PSITC=0.86
C
C  CALCULO COEFICIENTE GLOBAL DE TRANSFERENCIA DE CALOR
C
      FMG=FNG*AMG
      GMG=FMG/AREA
      ATC=DAPDZ/AREA
      RE=GMG/(ATC*VIGM*PSITC)
      BTC=ATC*DP*PSITC**2
      PR=CPGM*VIGM/CTGM
      IF(RE.GT.50.) GO TO 66
      NU=0.91*BTC*RE**0.49*PR**(1./3.)
      GO TO 67
66 CONTINUE
      NU=0.61*BTC*RE**0.59*PR**(1./3.)
67 CONTINUE
      CTTSG=NU*CTGM/DP
      CTTSGV=CTTSG
68 CONTINUE
C
C  CORRECAO CTTSG DEVIDA A TRANSFERENCIA DE MASSA
C
      IF((RRN(12)+RRN(14)).EQ.0.) GO TO 99
      FIT=(RRN(12)*CPG+RRN(14)*CP(9))/CTTSG
      TETAT=FIT/(EXP(FIT)-1.)
      CTTSG=CTTSG*TETAT
99 CONTINUE
C
C  REACOES NA FASE GASOSA
C
      DO 777 IK=1,IY
      FMGP(IK)=0.
      FMVS(IK)=0.
777 CONTINUE
C
C      INICIO ROTINA DE INTEGRACAO AO LONGO DE Y
C
      DO 40 I=1,IY-1
      CRP=0.
      HLV(I)=0.
      FMVS(I)=0.
      FMGP(I)=0.

```

```

C
C CALCULO CALOR ESPECIFICO VAPOR D'AGUA (J/(KG.K)) : SUBROTINA PH2OLV
C
  CPV=(8.10-0.72E-3*TSP(1,I)+3.63E-6*TSP(1,I)**2.
  * -1.16E-9*TSP(1,I)**3.)*232.34
C
C COMANDO DE DISPARO DE SECAGEM PARA I<IY-1
C
  IF(I.LT.IY-1.AND.TSP(1,I).GE.TSAT(I).AND.JCS(I).EQ.0) THEN
    UM(1,I)=0.9999*UMAT
    ROMS(1,I)=ROMADS*(1.+UM(1,I))
    JCS(I)=1
    WRITE(6,63) ZP,M,I,JCS(I)
63    FORMAT(/,5X,'DISPARO DE SECAGEM',/,2X,'ZP=',E12.5,
  * 2X,'M=',I10,/,2X,I2,2X,'JCS(1)=' ,I2,/)
  END IF
  IF(I.EQ.IY-1.AND.TSP(1,IY).GE.TSAT(I).AND.JCS(I).EQ.0) THEN
    UM(1,I)=0.9999*UMAT
    ROMS(1,I)=ROMADS*(1.+UM(1,I))
    JCS(I)=1
    WRITE(6,63) ZP,M,I,JCS(I)
  END IF
C
C COMANDO DE DISPARO DE PIROLISE
C
  IF(TSP(1,I+1).GE.TDP.AND.JCP(I+1).EQ.0.AND.
  * UM(1,I).EQ.0) THEN
    ROMS(1,I)=0.99*ROMADS
    JCP(I+1)=1
  END IF
C
C***** REGIAO DE AQUECIMENTO CARVAO *****
C
  IF(ROMS(1,I).EQ.ROC) THEN
    PRINT*,' '
    PRINT*,'REGIAO DE AQUECIMENTO DE CARVAO'
C
C CALCULO CONDUTIVIDADE SOLIDO CARVAO (W/(M.K)) : ALVES E FIGUEIREDO
C
  CONDS(I)=CONDC
  CPSP(I)=CEC
  END IF
  IF(ROMS(1,I).GT.ROC) THEN
    IF(ROMS(1,I).LT.ROMADS) THEN
C
C***** REGIAO DE PIROLISE *****
C
C
C
C CALCULO CALOR ESPECIFICO E CONDUTIVIDADE MATERIAL SOLIDO
C PIROLISANDO (J/(KG.K)):FIGUEIREDO
C
  CONDC=0.091+8.2E-5*TSP(1,I)
  ALFA=(ROMS(1,I)-ROC)/(ROMADS-ROC)
  CPSP(I)=ALFA*CEMS+(1.-ALFA)*CEC
  CONDS(I)=ALFA*CONDMS+(1.-ALFA)*CONDC
C
C CALCULO CONSTANTE REACAO DE PIROLISE CRP (1/S)
C
  CRP=AK0*EXP(-ESRPIR/TSP(1,I))

```

```

C
C CALCULO DE FMGP EM I
C
      FMGP(I)=CRP*ROVOL(1,I)*DY
      ELSE
C
C***** REGIAO DE AQUECIMENTO MADEIRA SECA *****
C
      IF(ROMS(1,I).EQ.ROMADS) THEN
        PRINT*,' '
        PRINT*,'REGIAO DE AQUECIMENTO DE MADEIRA SECA'
C
C CALCULO CONDUTIVIDADE MADEIRA SECA (W/(M.K)) : ALVES E FIGUEIREDO
C
        CONDS(I)=CONDMS
        CPSP(I)=CEMS
        END IF
      IF(ROMS(1,I).GT.ROMADS.AND.ROMS(1,I).LT.ROMAT) THEN
C
C***** REGIAO DE SECAGEM *****
C
C
C ENTALPIA DE VAPORIZACAO D'AGUA (J/KG)
C
      HLV(I)=2.26E+6
C
C TEMPERATURA DE SATURACAO DA UMIDADE (K)
C
      TSAT(I)=373.
      TSP(2,I)=TSAT(I)
      IF(I.EQ.1) THEN
        TSP(1,I-1)=TSAT(I)
        CONDS(I-1)=CONDS(I)
      END IF
      IF(I.EQ.IY-1) THEN
        FMVS(I)=CTTSG*(TGE-TSAT(I))/HLV(I)
      ELSE
        FMVS(I)=(CONDMS*(TSP(1,I+2)-TSAT(I))-
*          CONDS(I-1)*(TSAT(I)-TSP(1,I-1)))/(DY*HLV(I))
      END IF
      IF(FMVS(I).LT.0.) FMVS(I)=0.
      END IF
      IF(ROMS(1,I).EQ.ROMAT) THEN
C
C***** REGIAO DE AQUECIMENTO MADEIRA UMIDA *****
C
C
C CALCULO CALOR ESPECIFICO MATERIAL SOLIDO MADEIRA UMIDA
C
      CPSP(I)=UM(1,I)/(1.+UM(1,I))*4.184E+3+1./(1.+UM(1,I))*CEMS
C
C CONDUTIVIDADE SOLIDO MADEIRA UMIDA (W/(M.K)) : ALVES E FIGUEIREDO
C
      CONDS(I)=CONDMS+0.396*UM(1,I)
      END IF
      END IF
      END IF
C
C CALCULO FLUXOS MASSICOS DE GAS PIROLISE E VAPOR SECAGEM EM I

```

```

C
  IF(I.GT.1) THEN
    FMVS(I)=FMVS(I-1)+FMVS(I)
    FMGP(I)=FMGP(I-1)+FMGP(I)
  END IF
C
C CALCULO DOS COEFICIENTES A,B,C,D
C
  SENS=FMSP(1,I)*CPSP(I)
C
C CALCULO COEFICIENTE A
C
  A=-(FMGP(I)*CEGP+FMVS(I)*CPV)/SENS*DZP/DY
C
C CALCULO COEFICIENTES B1 E B2
C
  IF(I.EQ.1) THEN
    CONDS(I-1)=CONDS(I)
  END IF
C
  B1=CONDS(I)/SENS*DZP/DY/DY
  B2=CONDS(I-1)/SENS*DZP/DY/DY
C
C CALCULO COEFICIENTE C
C
  C=0.
C
C CALCULO COEFICIENTE D
C
  D=-(HGP+HP-HS)/SENS*DZP*CRP*ROVOL(1,I)
C
C CALCULO ENTALPIA GAS PIROLISE E MATERIAL SOLIDO
C
  HGP=CEGP*(TSP(1,I)-T0)
  HS=CPSP(I)*(TSP(1,I)-T0)
C
C CONDICÕES DE CONTORNO
C
  IF(I.EQ.1) THEN
    TSP(1,I-1)=TSP(1,I+1)
  END IF
  IF(I.EQ.IY-1) THEN
    TSP(1,I+1)=(TSP(1,I)+DY*CTTSG/CONDS(I)*TGE)/(1.+
    * DY*CTTSG/CONDS(I))
  END IF
C
C DEFINICAO DA TEMPERATURA DE SATURACAO NA REGIAO DE SECAGEM
C
  IF(UM(1,I).LT.UMAT.AND.UM(1,I).GT.0.) GO TO 999
C
C CALCULO DE TEMPERATURA DA FASE SOLIDA EM ZP+DZP (K) PARA 1<=I<IY
C
  TSP(2,I)=TSP(1,I+1)*(A+B1)+TSP(1,I)*(1.-A-B1-B2)+TSP(1,I-1)*B2
  * +D
C
  999 CONTINUE
C
C CALCULO DE UMIDADE EM ZP+DZP (KG H2O/KG MAD SEC)
C

```

```

IF(UM(1,I).GT.0..AND.UM(1,I).LT.UMAT) THEN
  UM(2,I)=UM(1,I)-DZP/DY*FMVS(I)/VZ/ROMADS
  IF(UM(2,I).LT.0.) THEN
    UM(2,I)=0.
  END IF
  FMSP(2,I)=ROMADS*VZ*(1.+UM(2,I))
  ROMS(2,I)=FMSP(2,I)/VZ
END IF
C
C CALCULO DA DENSIDADE DE MATERIAL VOLATIL E SOLIDO
C EM ZP+DZP (KG MATVOL/M3 E KG MAT.SOL/M3)
C
  IF(ROVOL(1,I).GT.0..AND.UM(1,I).EQ.0.) THEN
    ROVOL(2,I)=ROVOL(1,I)*(1.-CRP*DZP/VZ)
    IF(ROVOL(2,I).LT..01*ROV) ROVOL(2,I)=0.
    ROMS(2,I)=ROC+ROVOL(2,I)
    FMSP(2,I)=ROMS(2,I)*VZ
  END IF
  FMS=FMS+FMSP(2,I)*AREA/FLOAT(IY-1)*(1.-EL)
40 CONTINUE
C
C CONTROLADOR DE IMPRESSAO DE RESULTADOS
C
  MIMP=MIMP-1
  IF (MIMP.LE.0) THEN
C
C ESTOCAGEM DE DADOS
C
    MIMP=50
    JJJ=JJJ+1
    DELZ=FLOAT(MIMP)*DZP
    DQEX(JJJ)=FQEX*PI*DELZ*DL
    DTEXP(JJJ)=TEXP-273.15
    Y1(JJJ)=(ZL-ZP)/ZL
    YT(JJJ,1)=TSP(1,IY)
    YT(JJJ,2)=TGE
    DO 73 KT=3,IY+1
      YT(JJJ,KT)=TSP(1,KT-2)
73 CONTINUE
    DO 2018 K=1,12
      YX(JJJ,K)=Y(K)
      AYX(JJJ,K)=Y(K)/(1.-Y(9)-Y(13))
2018 CONTINUE
    DO 2118 K=14,19
      YX(JJJ,K)=Y(K)
2118 CONTINUE
    DO 2019 KK=1,10
      YX4(JJJ,KK)=RRN(KK)
      K=KK+10
      IF(K.GT.14) GO TO 2019
      YX6(JJJ,KK)=RRN(K)
2019 CONTINUE
    DO 39 KK =1,19
      CS(JJJ,KK)=FP(KK)
39 CONTINUE
    CS(JJJ,20)=TGE
    CS(JJJ,21)=TSP(1,IY)
    CS(JJJ,22)=TSP(1,1)
    VMUMID(JJJ)=FNUMID*AMW(9)

```

```

    UMBU(JJJ)=VMUMID(JJJ)/(VMUMID(JJJ)+FMSPG)*100.
C
C FIM DA ESTOCAGEM DE DADOS
C
C CALCULO DOS FLUXOS MOLARES DE PIROLISE E SECAGEM
C
    RRN(12)=FMGP(IY-1)/AMMV
    RRN(14)=FMVS(IY-1)/AMW(9)
C
C     BALANCO DE MASSA DA FASE GASOSA
C
C
C
C CALCULA OS COEFICIENTES ESTEQUIOMETRICOS DAS VARIAS REACOES
C
    CALL ESTEQ(TS,CR)
C
C     CALCULO VAZAO MOLAR DE ESPECIE QUIMICA DA FASE GASOSA
C
    DO 70 K=1,19
    DF(K)=0.
    DO 71 I=12,14
    SUP=DAPDZ
    IF(K.LE.13) THEN
        DF(K)=DF(K)+SUP*CR(K,I)*RRN(I)
    END IF
    IF(K.GT.13.AND.I.EQ.12) THEN
        DF(K)=DF(K)+SUP*CR(K,I)*RRN(I)*AMW(K)
    END IF
70 CONTINUE
    IF(K.LE.13) THEN
        FP(K)=FP(K)-DF(K)*DZP
    END IF
    IF(K.GT.13) THEN
        FP(K)=FP(K)+DF(K)*DZP
    END IF
    CALL CPH(K,TSP(1,IY),CP(K),HG(K),AICPTS(K))
70 CONTINUE
    FNUMID=FNUMID-RRN(14)*SUP*DZP
C
C     BALANCO DE ENERGIA DA FASE GASOSA
C
C
C
C CALCULO DE DTSTG PARA OBTENCAO DE HTCSG
C
    DTSTG=TSP(1,IY)-TGE
C
C CALCULO DE ENTALPIA DE REACAO E ENTALPIA TRANSPORTADA POR CONVECCAO
C
    HGG=0.
    HTMGS=0.
    DO 12 I=1,14
    SUP=AREA
    IF(I.EQ.12.OR.I.EQ.14) SUP=DAPDZ
    HR(I)=0.
    DO 13 K=1,13
    IF(I.EQ.1.OR.I.EQ.2.OR.I.EQ.6.OR.I.EQ.7.OR.I.EQ.12.OR.I.EQ.14
*) GO TO 14
    HR(I)=HR(I)+CR(K,I)*HG(K)
    IF(I.EQ.13) HR(I)=0.00000

```

```

      GO TO 13
14 CONTINUE
      IF(CR(K,I).GT.0.) HTMGS=HTMGS+CR(K,I)*RRN(I)*
      *SUP*(AICPTS(I)-AICPTG(I))
13 CONTINUE
C
C  CALCULO ENTALPIAS DE REACAO HGG
C
      HGG=HGG+HR(I)*RRN(I)*SUP
12 CONTINUE
C
C  CALCULO DO CALOR TROCADO POR CONVECCAO ENTRE AS FASES SOLIDA E GASOSA
C
      HTCSG=DAPDZ*CTTSG*DTSTG
C
C  CALCULO DO CALOR TROCADO ENTRE O GASEIFICADOR E O MEIO NA
C  PARTE COM ISOLAMENTO
C
      AEXDZ=PID*DZ
      IF((XIS.EQ.0.).OR.(KIS.EQ.0.)) GO TO 80
      CALL QEXRC(TGE,AEXDZ,QEX,TEXP,CTTEX,CTTIS,FQEX)
      TPIG=TGE
80 CONTINUE
      HTPERD=-FQEX*AREA*4./DL
C
C  CALCULO DE TEMPERATURA DA FASE GASOSA EM ZP+DZ
C
      DFTG=(-HGG+HTCSG+HTMGS-HTPERD)/(CPG*FNG)
      TGE=TGE-DFTG*DZP
C
C  DETERMINACAO DE NOVA COTA ZP
C
      ZP=ZP+DZP
C
C  ALTERACAO DE VALORES DE TEMPERATURA FASE SOLIDA
C
      DO 35 JB=1,IY-1
      TSP(1,JB)=TSP(2,JB)
      ROVOL(1,JB)=ROVOL(2,JB)
      ROMS(1,JB)=ROMS(2,JB)
      FMSP(1,JB)=FMSP(2,JB)
      UM(1,JB)=UM(2,JB)
35 CONTINUE
30 CONTINUE
6666 CONTINUE
C
C  DETERMINACAO DE PERDA DE CALOR PELAS PAREDES DO FORNO DQEXT(JJJ)
C
      JCONTR=JJJ
      DO 345 JCALOR=J+1,JJJ
      DQEXT(JCALOR)=DQEXT(JCALOR-1)+DQEX(JCONTR)
      JCONTR=JCONTR-1
      DQRES(JCONTR)=DQEXT(JCALOR)
345 CONTINUE
      DO 347 JCALOR=J+1,JJJ
      DQEXT(JCALOR)=DQRES(JCALOR)
347 CONTINUE
      QEXT=DQEXT(J+1)
C

```

C AJUSTE COTA Z

C

DIFZ=Y1(JJJ)-Y1(J)

DO 346 JZ=J+1, JJJ

Y1(JZ)=Y1(JZ)-DIFZ

346 CONTINUE

C

F(13)=FP(13)

DO 37 N=1,19

WRITE(6,2223)N,Y(N),F(N),FP(N)

2223 FORMAT(/,2X,'I=',I2,5X,'Y(I)=' ,E12.5,2X,'F(N)=' ,E12.5,2X,'FP(N)=' ,
*E12.5)

37 CONTINUE

RETURN

END

E-26 SUBROTINA DE CONVERGÊNCIA DA TEMPERATURA DA FASE SÓLIDA NA BASE DO GASEIFICADOR.

```

SUBROUTINE RCTEMP(DTCONV,XCT,TEMPCZ,TGMAX,TGMIN,CLTEMP)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
EXTERNAL DTCONV
ITMAX=30
IT=0
TFGMAX=TGMAX
TFGMIN=TGMIN
10 TFGM=(TFGMAX+TFGMIN)/2.
SDTDZ=DTCONV(XCT,TFGM)
DTMXMI=ABS(TFGMAX-TFGMIN)
IF(DTMXMI.LE.CLTEMP.AND.SDTDZ.LE.0.) GO TO 100
IF(SDTDZ.GT.0.) TFGMAX=TFGM
IF(SDTDZ.LE.0.) TFGMIN=TFGM
IT=IT+1
IF(IT.GT.ITMAX) GO TO 200
GO TO 10
100 TEMPCZ=TFGM
RETURN
200 WRITE(6,300)
300 FORMAT(/,2X,'A CONVERGENCIA DA TEMPERATURA ULTRAPASSOU O NUMERO
* MAXIMO DE ITERACOES',/)
STOP
END

```

E-27 FUNÇÃO DE CÁLCULO DO PARÂMETRO DE CONVERGÊNCIA DA TEMPERATURA DA FASE SÓLIDA NA BASE DO GASEIFICADOR.

```

FUNCTION DTCONV(XCT,TCT)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
EXTERNAL FCN,FCNJ
REAL KIS
INTEGER IWK(23)
DIMENSION F(23)
DIMENSION DTEXP(1000),DQEX(1000),DQEXT(1000),Y1(1000)
DIMENSION YX4(1000,10),AYX(1000,12)
DIMENSION YX6(1000,7),YT(1000,20)
DIMENSION YX(1000,19),CS(1000,24)
DIMENSION FRI(21),XGRI(21),WGRI(21),FRS(21),FRE(21)
DIMENSION XGRS(13),WGRS(13),XGRE(13)
DIMENSION DF(23)

```

```

DIMENSION RRN(14),DFDZ(23),WK(358)
COMMON/CCCC01/DTEXP,DQEX,DQEXT,YX4,YX6,YX,YT,Y1,CS,AYX
COMMON/CCCC02/DF,FRS,FRI,FRE,WGRS,WGRI,XGRS,XGRI,XGRE
COMMON/CCCC03/FNAR,FNVP,XN2CB,QNSEN,HVH2O,AMGRS,AMGRI,AMGRE
COMMON/CCCC04/CPGRS,CPGRI,CPGRE,TGRS,TGRI,TGRE,TGCRS,TGCRI,TGCRE
COMMON/CCCC05/FNGRS,FNGRI,FNGRE,FMGRS,FMGRI,FMGRE,FMRZ
COMMON/CCCC06/J,TENTG,QEXT,HPERD,TSMAX,ZTSMAX,JTMAX,FMHIE,FRZ(21)
COMMON/FF/F
COMMON/DD/H(19),CP(19)
COMMON/DDDD/AICP(19),CPG,AICPTS(19),AICPTG(19)
COMMON/CRRRRR/CR(19,14)
COMMON/VVVVVV/FMTV,FNTV,AV(13),DEV(18),FNV(13),FMV(13),XV,WV
COMMON/VVVVV1/YV(13)
COMMON/ALCATR/ALC(18)
COMMON/BD/AMW(19)
COMMON/DAD/UMIDAD,VOLAT,CARFIX,CINZAS,PCSMT,FMMT,ARMT,VPMT,
1TMT,TAR,TVP,POPER,DL,ZL,DIAMPT,ITIPO,IFORM,MODELQ,XO2CB,DLZ(10)
COMMON/DAD2/WC,WH,WO,WN,WS,WZ
COMMON/DAD1/WCBS,WHBS,WOBS,WNBS,WSBS,WZBS
COMMON/OUT/FMAR,FMVP
COMMON/ABC/HF298(13)
COMMON/CIM/IMPRI
COMMON/FRRECC/IREC,ZRS,FATRS,ZRI,FATRI,ZREE
COMMON/QQ/TEXT,VV,EPS,XIS,KIS
COMMON/SSS/Y(19),WG(13),AMMG,FNG,FMS
COMMON/RRR/ROMAT,ROCINZ,VPORM,EL,EP,ROGB,ROREAL,JAFCMC,
* VPORZ,X0CFX,X0VOL
COMMON/QQQCAM/HCAM,EANU,ESCHG,CTCHG,EMISPI,FMAC,TETAC,PRECAM
COMMON/SECCCC/TASEC,ZASEC,JAPPS,HVSEC
COMMON/GEOCAM/DIANU,DEANU,ATANU,DEQANU
COMMON/PARRR3/HR(18)
COMMON/PARRR4/AREA,TS,TG,PID,FQEX,HTPERD,AEXDZ,QEX,TSH2O,TASECG
* ,AREAZ0,AREAZL
COMMON/PARRR5/PI,R,CPS,DP,ROP,DZ,P,HGG,HSS,HTCSG,HTMSG,TEXP,TEBAC
COMMON/PARRR6/HG(19),HTMGS
COMMON/PARRR7/C,HI,O,AN,S,CINZ,CETM,HIETM,OETM,ANETM,SETM,ZETM,XC
* ,UMIETM,FAUXDP,ZLEITO
COMMON/PARRR8/DFDZ
COMMON/RCINNN/RRN
COMMON/CCCAM/TAC,TPIG,QCAMZ,FQCAMZ,IEB,HISOL
COMMON/APRRRR/APR(3,18)
COMMON/FRTCZ1/TMAXPS
COMMON /VINI/EMS,FCRAD
COMMON/DTSDZ/DTSI
COMMON/RADI/RADI

```

C
C
C
C
C

COMPUTA AR ARRASTADO JUNTO COM O MATERIAL PARA DENTRO
DO GASEIFICADOR

```

CNTMT=P/(R*TMT)
FV0=FMMT/ROGB
FN0AR=CNTMT*FV0*EL
FN0N2=FN0AR*0.79
FN0O2=FN0AR-FN0N2

```

C
C

C ESTABELECE VALORES INICIAIS PARA A INTEGRACAO DO SISTEMA
C DE EQUACOES DIFERENCIAIS

```

C
C
  DO 106 I=1,14
    RRN(I)=0.
106 CONTINUE
C
  TEMPCZ=TCT
C
  XC=XCT
C
  FAUXDP=0.
C
  DO 107 K=1,23
    FRI(K)=0.
    DFDZ(K)=0.
107 CONTINUE
    QCAMZ=0.
C
  F(1)=0.
  F(2)=0.
  F(3)=FNAR*XN2CB
  F(4)=0.
  F(5)=0.
  F(6)=0.
  F(7)=0.
  F(8)=FNAR*XO2CB
  F(9)=FNVP
  F(10)=0.
  F(11)=0.
  F(12)=0.
  F(13)=0.
  F(14)=C*(1.-XC)
  F(15)=HI*(1.-XC)
  F(16)=O*(1.-XC)
  F(17)=AN*(1.-XC)
  F(18)=S*(1.-XC)
  F(19)=CINZ
  F(20)=TEMP CZ
  F(21)=TENTG
  F(22)=0.
  F(23)=DTSI
  DO 70 K=1,21
    FRZ(K)=F(K)
70 CONTINUE
C
  QEXT=0.0
  QCAM=0.0
  TAC=TETAC
  HPERD=0.0
  JAPPRI=0
  JAPPRS=0
  JAAREC=0
  JAPPS=0
  ICOEFV=0
  Z=0.0
  J=1
  TS=F(20)
  TG=F(21)
C

```

```

TSMAX=TEMPCZ-273.15
FNG= 0.0
DO 53 M=1,13
53 FNG=FNG+F(M)
FMRZ=0.
DO 158 M=14,19
FMRZ=FMRZ+F(M)
158 CONTINUE
C
DO 65 I=1,13
IF(F(I).LE.0.) F(I)=0.
65 CONTINUE
y(8)=f(8)/fng
RADI=0.
20 CONTINUE
J=J+1
C
DZ=1.0E-6
C
C AQUI E CHAMADA A SUBROTINA PARA RESOLUCAO DO SISTEMA DE
C EQUACOES DIFERENCIAIS ACOPLADAS
C
C ESTIMA DENSIDADE E DIAMETRO DE PARTICULA
C
JAFCMC=0
IF(F(14).GE.C) JAFCMC=1
FAUXDP=(F(14)+F(15)+F(16)+F(17)+F(18))/(C+HI+O+AN+S)
IF(FAUXDP.GT.1.) FAUXDP=1.
PRINT 57,J,RADI,Z,TS,TG,fauxdp
57 FORMAT(/,1X,'J=',I5,1X,'RADI=',E12.5,1X,'Z=',E12.5,1X,'TS=',E12.5
*,1X,'TG=',E12.5,1X,'fauxdp=',E12.5)
PRINT 97,Y(1),Y(2),Y(4),Y(5),Y(9)
97 FORMAT(/,1X,'CO=',E12.5,1X,'CO2=',E12.5,1X,'H2=',E12.5,1X,
*'CH4=',E12.5,1X,'H2O=',E12.5)
IF(MODELQ.EQ.0.AND.JAFCMC.EQ.0.
*AND.IFORM.EQ.1) DP=DIAMPT*FAUXDP**(1./3.)
IF(MODELQ.EQ.0.AND.JAFCMC.EQ.0.
*AND.IFORM.EQ.2) DP=DIAMPT*FAUXDP**(1./2.)
IF(MODELQ.EQ.0.AND.JAFCMC.EQ.0.
*AND.IFORM.EQ.3) DP=DIAMPT*FAUXDP
IF(DP.LE.0.) DP=DIAMPT*1.0E-10
ROP=ROMAT
IF(MODELQ.EQ.1.OR.JAFCMC.EQ.1) ROP=ROMAT*FAUXDP+ROCINZ*(1.-FAUXDP)
C
NEQD=23
TOL=1.0E-05
METH=2
MITER=3
INDEX=1
PROXIZ=Z+ZL/1000.
IF(PROXIZ.GT.ZL) PROXIZ=ZL
IF(PROXIZ.NE.ZL) GO TO 90
F(3)=F(3)+FN0N2
F(8)=F(8)+FN0O2
90 CONTINUE
C
CALL DIAML(Z)
AREA=PI*DL**2/4.

```

```

IF(Z.EQ.0) AREAZ0=AREA
IF(PROXIZ.EQ.ZL) AREAZL=AREA
PID=PI*DL
IF(HCAM.LE.0.0) GO TO 61
DIANU= DL+2.*ESCHG
DEANU= DIANU+2.*EANU
ATANU= PI*(DEANU**2-DIANU**2)/4.
DEQANU=4.*ATANU/(PI*(DIANU+DEANU))
61 CONTINUE
C
IF(J.EQ.2) PROXIZ=2.*DZ
DELZ=PROXIZ-Z
C
C   ROTINA DGEAR
C
CALL DGEAR(NEQD,FCN,FCNJ,Z,DZ,F,PROXIZ,TOL,METH,MITER,INDEX,
*1WK,WK,IERGEA)
IF(IERGEA.GT.128) GO TO 4999
C
C   CONDICAOES DE CONVERGENCIA DE TCINZ
C
IF(DFDZ(20).GT.0.AND.DFDZ(21).LT.0..OR.TS.LE.1073.) GO TO 1500
QEXT=QEXT+FQEX*PI*DELZ*DL
DQEX(J)=FQEX*PI*DELZ*DL
DQEXT(J)=QEXT
DTEXP(J)=TEXP-273.15
TG=F(21)
TS=F(20)
IF((Z.GT.HCAM).OR.(HCAM.LE.0.)) GO TO 72
QCAM=QCAM+QCAMZ
FMVC=(-QCAM-QNSEN)/HVVH2O
IF(FMVC.GE.0.) GO TO 76
FMVC=0.
GO TO 72
76 CONTINUE
IF(FMVC.LE.FMAC) GO TO 72
FMVC=FMAC
IEB=2
72 CONTINUE
C
IF(Z.LT.ZRS.OR.JAPPRS.EQ.1) GO TO 151
JAPPRS=1
C
C   CHEGOU NA RETIRADA SUPERIOR
C
FNGRS=0.
DO 152 K=1,13
FRS(K)=F(K)*FATRS
FNGRS=FNGRS+FRS(K)
F(K)=F(K)-FRS(K)
XGRS(K)=Y(K)
WGRS(K)=WG(K)
152 CONTINUE
FRS(21)=F(21)
FRS(20)=F(20)
TGRS=FRS(21)
AMGRS=AMMG
CPGRS=CPG/AMGRS
FMGRS=FNGRS*AMGRS

```

```

151 CONTINUE
  GO TO 88
  WRITE(6,400)J,TG,TS,RRN(1)
  *,Y(1),Y(2),Y(4),Y(8),Y(9)
400 FORMAT(/,2X,'J=',I5,2X,'TG=',E12.5,2X,'TS=',E12.5,2X,'RRN(1)='
  *,E12.5,/,',YCO=',E12.5,1X,'YCO2=',E12.5,1X,'YH2=',E12.5,1X
  *,'YO2=',E12.5,1X,'YH2O=',E12.5)
88 CONTINUE
C
  IF(Z.LT.ZL) GO TO 20
C
1500 DTCONV=DFDZ(20)
  WRITE(6,1111)XCT,TCT,Z
1111 FORMAT(/,2X,'XCT=',E12.5,2X,'TCT=',E20.12,2X,'ZMAX=',E12.5/)
C
  GO TO 4010
4999 CONTINUE
  PRINT 4998
4998 FORMAT(///,10X,'OCORREU ALGUM ERRO NA CONVERGENCIA DA TEMPERATU
  *RA DO FUNDO DO GASEIFICADOR',///)
  WRITE(6,1003) NEQD,Z,DZ,PROXIZ,TOL
1003 FORMAT(2X,'NEQD=',I3,2X,'Z=',E12.5,2X,'DZ=',E12.5,/,
  * 'PROXIZ=',E12.5,2X,'TOL=',E12.5,/)
  WRITE(6,1004) METH,MITER,INDEX,IERGEA
1004 FORMAT(2X,'METH=',I5,2X,'MITER=',I5,2X,'INDEX=',I5,/,
  * 'IERGEA=',I5,/)
  PRINT* ,IWK,WK
  STOP
4010 CONTINUE
  RETURN
  END

```