



Análise do Processo de Gaseificação do Bagaço de Cana-de-açúcar em Equipamento de Leito Fluidizado Borbulhante

Matheus Tozim Vargas Franco Netto Arakaki

Monografia em Engenharia Química

Orientadores:

Prof. Maurício Bezerra de Souza Jr., D.Sc.

Prof. Amaro Gomes Barreto Jr., D.Sc.

Setembro de 2013

Análise do Processo de Gaseificação do Bagaço de Cana-de-açúcar em Equipamento de Leito Fluidizado Borbulhante

Matheus Tozim Vargas Franco Netto Arakaki

Monografia em Engenharia Química submetida ao Corpo Docente da Escola de Química, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Engenheiro Químico.

Aprovado por:

Manuel Ernani de Carvalho Cruz, Ph.D.

Verônica Maria de Araújo Calado, D.Sc.

Carlos Alberto Silva Paulo, Eng.

Orientado por:

Maurício Bezerra de Souza Jr., D.Sc.

Amaro Gomes Barreto Jr., D.Sc.

Rio de Janeiro RJ – Brasil

Setembro de 2013

Arakaki, Matheus Tozim Vargas Franco Netto.

Análise do processo de gaseificação do bagaço de cana-de-açúcar em equipamento de leito fluidizado borbulhante/Matheus Tozim Vargas Franco Netto Arakaki. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2013.

xii, 75 p.; il.

(Monografia) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2013.

Orientadores: Maurício Bezerra de Souza Jr. e Amaro Gomes Barreto Jr e Amaro Gomes Barreto Jr.

1. Gaseificação. 2. Bagaço de Cana-de-açúcar. 3. Simulação. 4. Planejamento de experimentos. 5. Monografia. (Graduação – UFRJ/EQ). 5. Maurício Bezerra de Souza Jr, D.Sc. e Amaro Gomes Barreto Jr., D.Sc.

Dedico este trabalho à minha mãe Lilita, por sempre acreditar em mim e ter me dado liberdade e tempo para escolher minha carreira, sempre com muito apoio e carinho.

Também dedico este trabalho à minha namorada Viviane, pelo apoio e carinho ao longo dessa etapa tão importante em minha vida. Sem ela, não seria capaz de ultrapassar as dificuldades e alcançar todos os objetivos traçados.

AGRADECIMENTOS

A toda minha família, que sempre me apoiou e permitiu que esse momento chegasse. Aos meus irmãos Thiago e Thomas, que mesmo com todas as brigas e discussões na infância, foram fundamentais para meu desenvolvimento pessoal e acadêmico. E ao meu pai Armando por sempre ter me apoiado durante toda minha vida em todos os aspectos.

A todos meus amigos de faculdade com quem convivi nesses últimos cinco anos, com os quais todo esse tempo não pareceu tão longo.

Aos meus orientadores Maurício Bezerra de Souza Jr. e Amaro Gomes Barreto Jr., por fazerem parte da elaboração deste trabalho.

Aos meus amigos do colégio, que sempre estiveram comigo durante toda minha caminhada. Mesmo trilhando rumos bem distintos, todos possuíam palavras e conhecimentos que me auxiliaram nesta etapa.

A todos os professores e funcionários da Escola de Química, que me ajudaram ou simplesmente apenas fizeram seus devidos trabalhos da forma mais eficiente possível.

Agradeço também a todos os colegas de trabalho com quem convivi nesses últimos anos, seja na Agência UFRJ de Inovação, na Chemtech ou na Technip.

Resumo da Monografia apresentada à Escola de Química como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Engenheiro Químico.

Análise do Processo de Gaseificação em Equipamento de Leito Fluidizado Borbulhante do Bagaço de Cana-de-açúcar

Matheus Tozim Vargas Franco Netto Arakaki

Setembro, 2013

Orientadores: Prof. Maurício Bezerra de Souza Jr., D.Sc.

Prof. Amaro Gomes Barreto Jr., D.Sc.

No Brasil o bagaço de cana-de-açúcar é um dos maiores resíduos agroindustriais, uma vez que o país é o maior produtor de cana-de-açúcar no mundo. A gaseificação é uma das tecnologias mais promissoras que vêm sendo aperfeiçoadas e estudadas para utilização de resíduos, com baixo impacto ambiental, reduzindo as emissões de CO. O processo de gaseificação é bastante eficiente para a transformação de resíduos sólidos em energia (elétrica ou térmica) ou matéria-prima para a indústria química (combustíveis ou químicos diversos), na forma de gás de síntese. Tendo isso em vista, o presente trabalho estuda a modelagem estacionária unidimensional do processo de gaseificação de bagaço de cana-de-açúcar, pelo uso do *software* comercial CeSFaMBTM para realizar simulações do processo de gaseificação em um reator de leito fluidizado borbulhante, em escala piloto. O planejamento experimental foi feito visando a uma análise dos efeitos de três variáveis de entrada do processo – vazões de oxigênio e de vapor d'água e temperatura desses gases, a dois níveis – nas seguintes variáveis de resposta: composição do gás produzido, perda de carga no leito, temperatura média do leito e vazões do gás produzido. Por meio da discussão dos resultados obtidos, pode-se chegar a conclusões sobre o processo de gaseificação: para maior produção de H₂ é preciso minimizar a vazão de O₂ e vapor d'água dentro das faixas de vazão de 0,21 a 0,43 e 0,32 a 0,96 kg/h respectivamente. Para produção de gás de síntese, é preciso maximizar a vazão de O₂ e minimizar a de vapor. Os modelos obtidos puderam prever quantitativamente muitos efeitos do processo.

ÍNDICE

Capítulo I. Introdução.....	1
I.1. Motivação.....	1
I.2. Objetivo.....	2
I.3. Estrutura do Trabalho.....	3
Capítulo II. Gaseificação	4
II.1. Introdução.....	4
II.2. Reações envolvidas	5
II.3. Parâmetros do processo	8
II.4. Razão estequiométrica (RE).....	10
Capítulo III. Reatores Empregados no Processo	13
III.1. Leito fixo ou móvel	14
III.2. Leito fluidizado	15
III.3. Arraste.....	17
Capítulo IV. Metodologia de Estudo.....	18
IV.1. Modelagem do processo	18
IV.2. CeSFaMB™	19
IV.2.1. Dados de entrada (<i>Input</i>)	20
IV.2.1.1. Parâmetros de convergência numérica	20
IV.2.1.2. Geometria do equipamento	22
IV.2.1.3. Dados do processo	26
IV.2.2. Dados de saída do programa (<i>Output</i>).....	29
IV.2.3. Algoritmo de solução do modelo	31
IV.3. Planejamento experimental (Plano de simulações)	33
Capítulo V. Resultados e Discussões	41
V.1. Composição dos gases de saída	42
V.1.1. Base Total:	43
V.1.1.1. Base mássica:	43
V.1.1.2. Base molar:	44
V.1.1.2.1. Análise do H₂.....	46
V.1.1.2.2. Análise do CO:.....	47

V.1.1.2.3. Análise do CO ₂ :	49
V.1.1.2.4. Análise de H ₂ O:	51
V.1.2. Base Seca:	52
V.1.2.1. Base mássica:	52
V.1.2.2. Base molar:	52
V.2. Temperatura	53
V.3. Perda de carga	56
V.4. Vazões do gás de saída	59
V.4.1. Volumétrica	59
V.4.2. Mássica	59
Capítulo VI. Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros	61
Bibliografia	63
Apêndice I – Resultados Detalhados	66

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1 – Matriz energética nacional.	2
Figura 2 – Esquema do processo de pirólise (adaptado de (Basu, 2010)).....	7
Figura 3 – Gráfico da reposta do processo em relação à temperatura (adaptado de (Basu, 2006)).	9
Figura 4 – Diferentes tipos de reatores (adaptado de (Basu, 2006)).	13
Figura 5 – Reator de leito fixo/móvel (adaptado de (Basu, 2006)).	14
Figura 6 – Reator de leito fluidizado borbulhante (adaptado de (Geldart, 1986)).	15
Figura 7 – Reator de leito fluidizado circulante (Yang, 2003).	16
Figura 8 – Diferentes estados de um leito de partículas (adaptado de (Souza-Santos, 2010)).	16
Figura 9 – Tela de interface do CeSFaMB TM	21
Figura 10 – Esquema de um reator de leito fluidizado (Castellanos, 2012).	23
Figura 11 – Esquema de reator de leito fluidizado – Geometria cônica.....	24
Figura 12 – Tela de resultados CeSFaMB TM – Tabela de composições.	29
Figura 13 – Tela de resultados CeSFaMB TM – Perfil de temperatura.	30
Figura 14 – Tela de resultados CeSFaMB TM – Perfil de composição.	30
Figura 15 – Tela de resultados CeSFaMB TM – Perfil de vazões mássicas.	31
Figura 16 – Composição da corrente de saída em base total e mássica.	44
Figura 17 - Composição da corrente de saída em base total e molar.	45
Figura 18 - Composição da corrente de saída em base seca e mássica.	52
Figura 19 - Composição da corrente de saída em base seca e molar.....	53
Figura 20 – Gráfico das temperaturas médias no leito em cada simulação.....	54
Figura 21– Erro entre modelo x simulação - TML.....	56
Figura 22– Perda de carga do processo de gaseificação.....	57
Figura 23– Erro entre modelo x simulação - PCT.....	58
Figura 24 – Vazão volumétrica em cada simulação.	59
Figura 25 – Vazão mássica em cada simulação.	60

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1 – Etapas da gaseificação (Basu, 2006).	5
Tabela 2- Principais reações químicas dentro do processo de gaseificação (Gómez-Barea & Leckner, 2010) (adaptada por (Castellanos, 2012)).	8
Tabela 3 – Componentes da análise elementar de um sólido.....	10
Tabela 4 – Parâmetros de convergência.	22
Tabela 5 – Parâmetros do equipamento.....	25
Tabela 6 – Condições ambientais.	27
Tabela 7 – Características do bagaço da cana (Castellanos, 2012).	27
Tabela 8 - Distribuição de tamanho de partícula para o bagaço de cana (Castellanos, 2012).	28
Tabela 9 - Distribuição de tamanho de partícula para o material do leito (Castellanos, 2012)......	28
Tabela 10 - Valores do CeSFaMB™ para o bagaço de cana e o material inerte (Castellanos, 2012).	28
Tabela 11 – Faixa de operação – Plano experimental (2013).....	36
Tabela 12 – Faixa de operação – variáveis independentes.....	37
Tabela 13 – Faixa de operação – novas variáveis independentes.....	38
Tabela 14 – Flutuações em torno do ponto central.....	39
Tabela 15–Valores das variáveis independentes convertidos e normalizados.	40
Tabela 16 – Nomenclatura das Simulações.	42
Tabela 17 – Análise de H ₂ – todos os parâmetros.	46
Tabela 18 – Análise de H ₂ – Curvatura.	46
Tabela 19 – Análise de H ₂ – parâmetros relevantes.	47
Tabela 20 – Análise de CO – todos os parâmetros.....	47

Tabela 21 – Análise de CO – Curvatura.....	48
Tabela 22 – Análise de CO ₂ – todos os parâmetros.	50
Tabela 23 – Análise de CO ₂ – Curvatura.	50
Tabela 24 – Análise de H ₂ O – todos os parâmetros.	51
Tabela 25 – Análise de H ₂ O – Curvatura.	51
Tabela 26 – Análise da TML – todos os parâmetros.....	54
Tabela 27 – Análise da TML – Curvatura.....	55
Tabela 28 – Análise da PCT – todos os parâmetros.....	57
Tabela 29 – Análise da PCT – Curvatura.....	58
Tabela 30 – Análise de W – todos os parâmetros.....	60

NOMENCLATURA

Símbolo	Descrição	Dimensão
ρ	Densidade	kg/m ³
ε	Erro	
a_i	Coefficiente estequiométrico do componente i	
w_i	Fração mássica do componente i	
M_i	Massa molecular do componente i	
$F_{gás-est/real}$	Razão gás/combustível estequiométrico/real	

SOBRESCRITOS

Símbolo	Descrição
TM	Marca Registrada (<i>Trade Mark</i>)

SIGLAS

CeSFaMB – *Comprehensive Simulator of Fluidized and Moving Bed Equipment*

Char – Carvão ou carbonizado

Cp – Poder calorífico específico

HHV – Poder calorífico superior

PCT – Perda de carga total do sistema

RE – Razão estequiométrica

S/B – Razão vapor d'água / biomassa

Tar – Alcatrão

TML – Temperatura média do leito

W – Vazão mássica

Capítulo I. Introdução

I.1. Motivação

Durante o processo industrial são produzidos muitos resíduos, principalmente nas indústrias agrícolas. Enquanto a maioria dos resíduos tem como destino final a reutilização em ração para animais, outros, pelas suas características, são inadequados para consumo e têm, como destino final, a utilização como fertilizantes ou são queimados para aproveitamento térmico (Brito & Calado, 2012). No Brasil o bagaço de cana é um dos resíduos agroindustriais de maior relevância, dada a larga produção de cana-de-açúcar no país.

Tendo isso em vista, cada vez mais se faz necessário o desenvolvimento de rotas alternativas para o aproveitamento desses resíduos. A gaseificação é uma delas, sendo um processo bastante eficiente para a transformação dos resíduos sólidos em energia (elétrica ou térmica) ou matéria-prima para a indústria química (combustíveis ou químicos diversos), na forma de gás de síntese (Huber, Iborra, & Corma, 2006).

Os esforços para o desenvolvimento de tecnologias energéticas cada vez mais eficientes sempre tiveram como motivação aspectos predominantemente econômicos, fazendo com que, ainda nos dias de hoje, os combustíveis fósseis sigam como a principal fonte energética (Nemer, 2010). Porém, é possível observar na Figura 1, que a participação da biomassa na matriz energética nacional é bastante relevante, diferentemente do restante do mundo, onde ocorre a predominância de fontes não renováveis.

Matriz energética

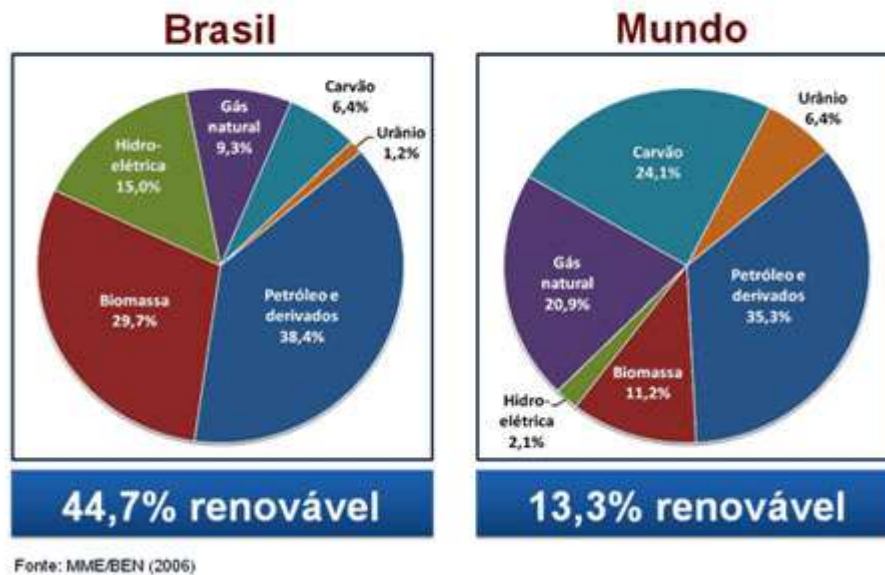


Figura 1– Matriz energética nacional.

A grande oferta de bagaço de cana-de-açúcar no país é determinante no fomento para o desenvolvimento de tecnologias para aproveitar este excedente, de forma a impulsionar a economia nacional.

I.2. Objetivo

Um conhecimento mais aprofundado sobre a tecnologia da gaseificação aplicada à biomassa, mais precisamente ao bagaço de cana, aumenta a capacidade de se desenvolver um processo eficiente para a utilização deste resíduo, diminuindo seus impactos ambientais, assim como gerando produtos de maior valor agregado para o desenvolvimento sustentável do país. Portanto, o presente trabalho teve como objetivo desenvolver modelos para prever a operação de um gaseificador de leito fluidizado borbulhante, empregando bagaço de cana-de-açúcar como biomassa, de forma a se dispor de maior conhecimento e ferramentas para posteriores aperfeiçoamentos e melhorias do processo, visando ao aumento da sua eficiência.

Para alcançar este objetivo foi feito um planejamento experimental para a análise de efeitos do processo de gaseificação, alterando três variáveis distintas e mais relevantes deste processo. Estas variáveis foram escolhidas analisando diversos estudos qualitativos

da literatura, além de consultas a indivíduos com experiência no assunto. Foram escolhidas, portanto, vazão de O₂, vazão de vapor d'água e temperaturas dos gases de entrada. A análise dos efeitos foi feita considerando as condições das variáveis de saída do processo: composição do gás produzido, perda de carga na placa distribuidora, no leito e a total, que é um indicativo de baixa eficiência do processo, temperaturas médias no leito e vazões volumétricas e mássicas do gás produzido.

Na ausência de um equipamento para realização dos experimentos, foram realizadas simulações no simulador comercial CeSFaMB™ (*Comprehensive Simulator of Fluidized and Moving Bed Equipment*) (Souza-Santos, 1987). Esse simulador foi utilizado porque, segundo seus desenvolvedores, já foi validado para unidades piloto e em escala industrial, tendo sido investigado por diferentes universidades, incluindo a UFRJ, e empresas, sendo citada a PETROBRAS (<http://csfmb.com>). Adicionalmente, o simulador é baseado em modelo unidimensional estacionário, que apresenta resultados muito bons para a proposta do presente estudo.

I.3. Estrutura do Trabalho

O estudo realizado se encontra disposto da seguinte forma nesta monografia:

- Capítulos II e III: são apresentadas as teorias que envolvem o processo de gaseificação.
- Capítulo IV: é apresentado o *software* utilizado para a realização das simulações para a modelagem do processo de gaseificação, assim como a metodologia e o planejamento experimental.
- Capítulo V: estão dispostos os resultados e as respectivas discussões e análises.
- Capítulo VI: são apresentadas as conclusões obtidas do estudo realizado e as sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo II. Gaseificação

II.1. Introdução

A gaseificação é um processo de conversão termoquímica que ocorre entre o oxigênio e as substâncias que possuam carbono em sua constituição (carvão, madeira etc.), para a obtenção de uma mistura de gases denominada gás de síntese ou *syngas* (acrônimo de *synthesis gas*) (Castro, Cassiano, & Ferreira, 2009).

Antes de se definir melhor o processo de gaseificação é preciso conhecer também dois outros processos, a pirólise e a combustão.

A pirólise é o processo de termoconversão realizado sob atmosfera isenta de oxigênio e proporcionado pela adição de calor a um material carbonáceo. Com a adição de oxigênio em excesso, tem-se a combustão, onde deve ocorrer a oxidação total do material. Na combustão ocorre à liberação da energia correspondente às reações exotérmicas, o que acarreta o aumento da temperatura. Já a gaseificação é um processo intermediário, que consiste na inserção de oxigênio insuficiente para a combustão completa. Neste processo acabam ocorrendo, simultaneamente, a pirólise e a combustão no interior do leito, sendo que as reações exotérmicas acabam por fornecer a energia necessária para a ocorrência das reações endotérmicas da pirólise (Goulart, Mariotoni, & Sánchez, 1999). Apesar das semelhanças, o processo de gaseificação é diferenciado dos demais em decorrência do objetivo de geração dos produtos. Pode-se dizer então que, distingue-se a gaseificação da combustão e da pirólise tanto pela quantidade de oxidante utilizada quanto pelos produtos de interesse gerados (Castro, Cassiano, & Ferreira, 2009).

A preocupação com o meio-ambiente vem cada vez mais sendo um tema de muita importância em diversos meios, e na área tecnológica não é diferente, se tornando um assunto de extrema relevância. A gaseificação é uma tecnologia promissora, para utilização de biomassa e resíduos, com baixo impacto ambiental, reduzindo assim as emissões de CO₂ (Campoy et al., 2009).

O processo de gaseificação é conhecido desde o século XIX, mas até hoje é um desafio projetá-lo e aperfeiçoá-lo de modo a atender às exigências de qualidade para suas

possíveis aplicações (Siedlecki et al., 2007). Entre os principais desafios podem ser citadas a dificuldade de fazer o escalonamento para unidades industriais e a instabilidade no processo de produção do gás (Chen et al., 2004).

O gás produzido no processo de gaseificação possui uma composição muito dependente de diversos fatores, como tipo de processo empregado, tipo de reator, condições operacionais, e diversos outros, mais específicos do processo, que serão abordados mais adiante, como por exemplo, o agente gaseificador, que é um dos reagentes do processo. É um gás, ou mistura de gases contendo O_2 , que é responsável por boa parte das reações de conversão do material carbonáceo, e também é fundamental, em um reator de leito fluidizado, para a fluidização do meio (Basu, 2010).

A aplicação do processo também é muito variável. Ele pode ser empregado para produção de gás combustível, geração de hidrogênio, produção de gás de síntese para síntese de *Fischer-Tropsch*, etc. É um processo extremamente versátil e já foi utilizado com matérias-primas tão distintas como pneus usados (Goulart, Mariotoni, & Sánchez, 1999), cascarilha de café, caroço de pêssigo e *miscanthus* (Brito & Calado, 2012). Costa & Bocchi (2012) discutiram as aplicações do bagaço de cana, uma delas sendo a geração de energia elétrica através da gaseificação. Os ciclos de cogeração de energia elétrica utilizando biomassa como combustível são bem difundidos na literatura e são chamados de BIG/GT-CC (*biomass integrated gasifier/gas turbinecombined cycle*) (Gómez, Silva, & Cortez, 1995).

II.2. Reações envolvidas

No processo de gaseificação, ocorrem dois processos principais simultaneamente, o da pirólise e o da combustão. No geral o processo como um todo pode ser dividido nas etapas apresentadas na Tabela 1.

Tabela 1 – Etapas da gaseificação (Basu, 2006).

Secagem	>150°C
Pirólise (devolatização)	150 – 700°C
Combustão	700 – 1500°C
Redução	800 -1100°C

A etapa de secagem possui a finalidade de se remover a umidade presente na matéria a ser processada. Sabe-se que a entalpia de vaporização da água é de 2256 kJ/kg. Logo a umidade inicial da matéria-prima alimentada dentro do gaseificador é um parâmetro importante para avaliar a viabilidade econômica de um processo de gaseificação (Castellanos, 2012). Ela determina a potência mínima do equipamento, já que essa é uma etapa do processo e precisa ser atendida.

A pirólise é o processo de decomposição térmica de uma matéria, seja sólida ou líquida, por meio de aquecimento extremamente elevado na ausência de oxigênio. Envolve o aquecimento, sem contato com oxigênio ou ar, do material com uma taxa específica até uma temperatura máxima, chamada de temperatura de pirólise, a qual é sustentada por um determinado tempo (Basu, 2010).

O esquema da Figura 2 demonstra sucintamente como ocorrem os fenômenos do processo de pirólise. O processo começa pela geração de gás condensável e uma parte sólida (carvão). Ocorrendo então a decomposição da fase gasosa condensável em gás não condensável (CO , H_2 e CH_4), líquido e carvão. Com isso, o processo pode ser representado pela equação genérica:

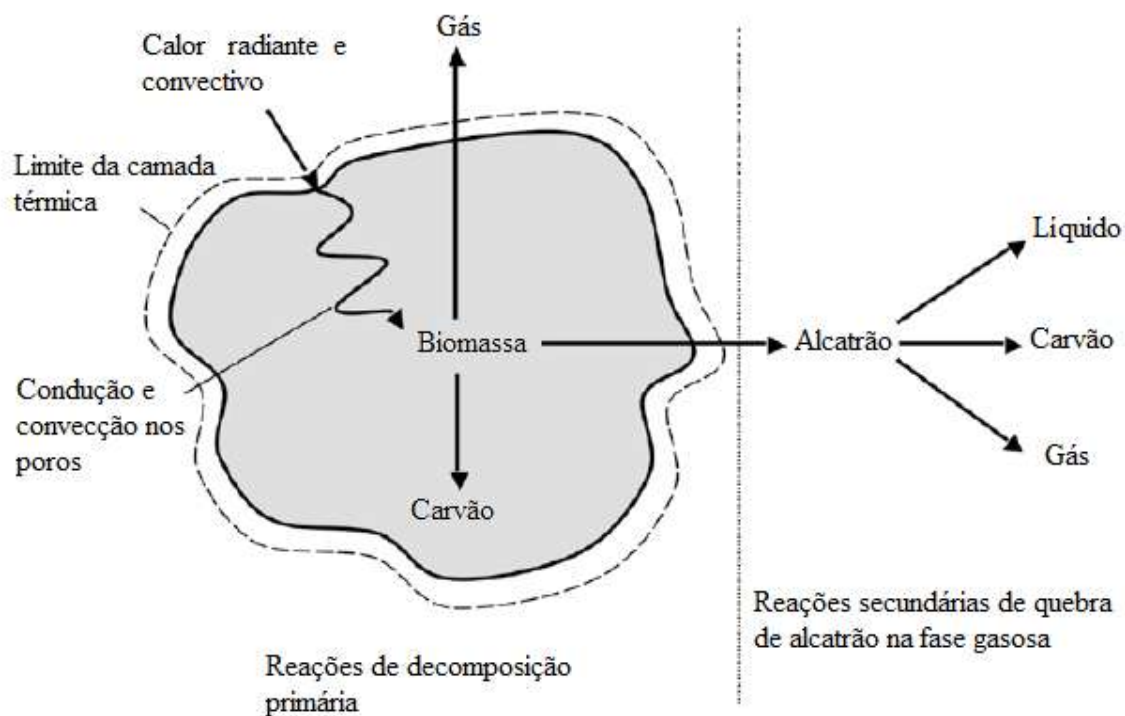
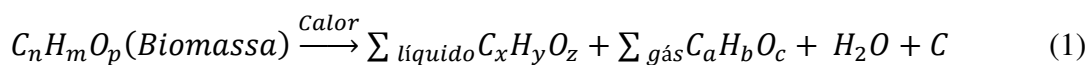


Figura 2 – Esquema do processo de pirólise (adaptado de (Basu, 2010)).



A pirólise é uma pré-etape essencial ao processo de gaseificação, constituindo-se em uma etapa rápida.

No processo de gaseificação, assim como no da pirólise, ocorrem tanto reações homogêneas como heterogêneas.

A etapa de combustão é uma etapa importantíssima, pois é a etapa responsável por fornecer calor ao sistema, uma vez que as reações de secagem, pirólise e gaseificação são endotérmicas. Sendo assim, essa etapa proporciona energia necessária para as etapas seguintes ocorrerem, no caso as reações finais da gaseificação. Essas reações finais sendo favorecidas obtêm-se assim o produto final, um gás com composição de acordo com as especificações e fatores do processo.

A Tabela 2 mostra as principais reações do processo.

Tabela 2- Principais reações químicas dentro do processo de gaseificação (Gómez-Barea & Leckner, 2010) (adaptada por (Castellanos, 2012)).

Estequiometria	Calor de reação [kJ/mol] ^a	Nome da reação
Reações homogêneas		
$\text{CO} + \frac{1}{2}\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2$	-283	Oxidação de monóxido de carbono
$\text{H}_2 + \frac{1}{2}\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}$	-242	Oxidação de hidrogênio
$\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$	-803	Oxidação de metano
$\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}_2$	-41	Reação de deslocamento de água
Reações heterogêneas		
Gaseificação de carbonizado		
$\text{C} + \text{CO}_2 \rightleftharpoons 2\text{CO}$	+173	Reação de Boudouard
$\text{C} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2$	+131	Gaseificação com vapor
$\text{C} + 2\text{H}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_4$	-75	Hidro-gaseificação
Combustão do carbonizado		
$\text{C} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$	-394	Combustão completa do carbonizado
$\text{C} + \frac{1}{2}\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}$	-111	Combustão parcial do carbonizado

^a Os sinais positivos ou negativos antes do valor do calor de reação indicam se a reação é endotérmica ou exotérmica, respectivamente.

II.3. Parâmetros do processo

O produto final de interesse gerado pelo processo de gaseificação é uma mistura de gases, como o monóxido de carbono, hidrogênio, metano, entre outros. A sua composição depende das condições operacionais do processo. Dentre os principais parâmetros estão a pressão e a temperatura de operação do equipamento. Outros fatores que influenciam também são as características do material a ser gaseificado.

O aumento da temperatura no processo geralmente favorece as reações da gaseificação, como a de Boudouard e de gaseificação com vapor, e desfavorece a de hidrogaseificação, descritas na Tabela 2. Portanto, isso mostra que elevadas temperaturas são recomendadas para obter um gás de síntese mais rico (Basu, 2006). A Figura 3 ilustra a resposta da temperatura em relação à reação de Boudouard (a), gaseificação com vapor (b) e hidrogaseificação (c).

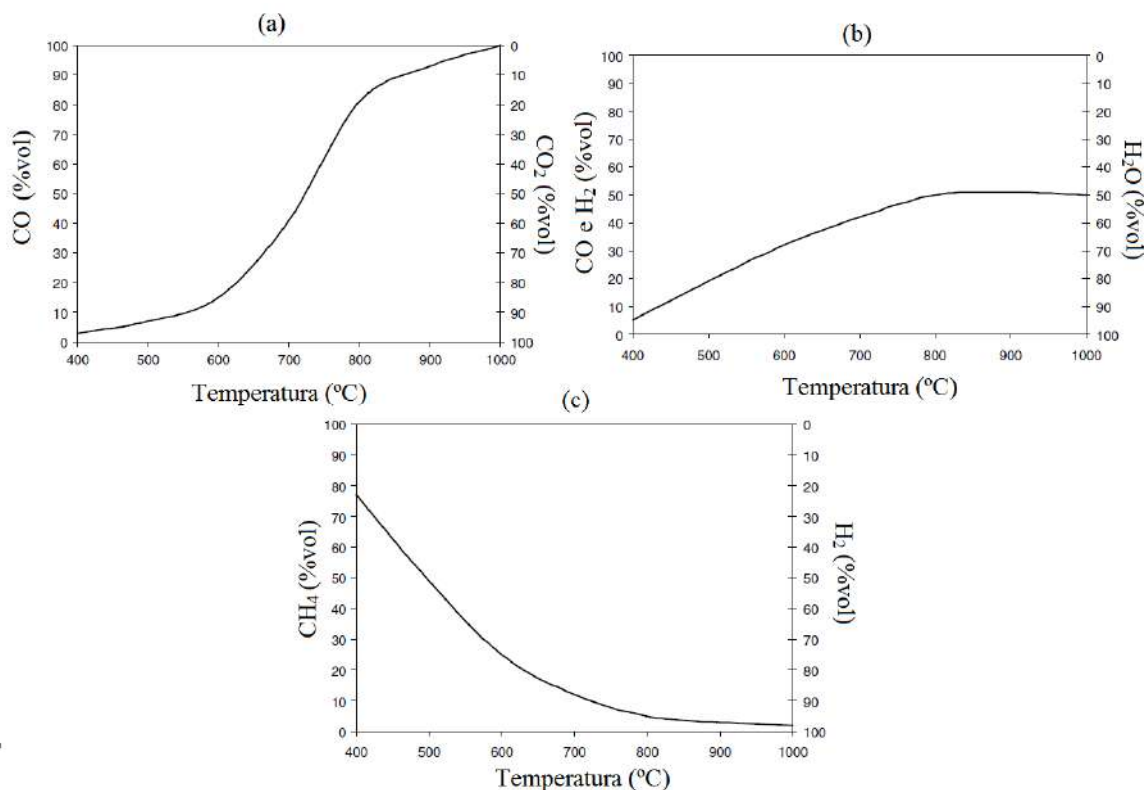


Figura 3 – Gráfico da resposta do processo em relação à temperatura (adaptado de (Basu, 2006)).

Em relação às características do material a ser gaseificado, pode-se destacar a sua reatividade, volatilidade, conteúdo de cinzas e umidade.

Basu, (2006), explanou de forma concisa a importância e influência desses fatores no processo. A reatividade da matéria está relacionada diretamente com a distribuição de partículas e suas características geométricas. Partículas menores e com alta porosidade tendem a possuir maior área superficial para a transferência de massa, resultando assim em maiores taxas reacionais. A volatilidade do material sólido determina a facilidade com que ele irá reagir para formar gás, diminuindo assim a quantidade de carvão (carbonizado) produzido. Portanto, altas volatilidades necessitam de menos quantidade de agente

gaseificador e menor tempo reacional, assim como aumenta a eficiência do processo. A quantidade de cinzas não influencia diretamente o produto final, mas sim o processamento. Grandes quantidades dificultam a operação, diminuindo assim a eficiência do equipamento. Finalmente, a umidade do material é determinante na etapa da secagem, visto que uma matéria com maior umidade aumentaria a quantidade de energia necessária para esta etapa. Logo, uma matéria com baixa umidade é mais eficiente para o processo de gaseificação (Basu, 2006).

II.4. Razão estequiométrica (RE)

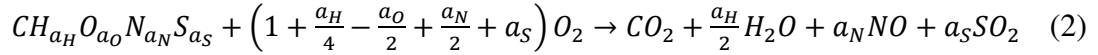
Um parâmetro muito importante e utilizado no processo de gaseificação é a razão estequiométrica. Sua definição é: razão da quantidade de oxigênio utilizado para a gaseificação em relação à quantidade teórica de oxigênio para ocorrer a combustão completa da matéria (Castellanos, 2012).

O combustível sólido que alimenta o reator é caracterizado pela sua análise elementar e análise imediata. Na análise elementar, é mostrada a composição do combustível sólido em função dos seus elementos básicos (Castellanos, 2012). A análise é feita tomando como base as frações mássicas de cada componente. A Tabela 3 permite observar os componentes relativos a essa análise e seus respectivos símbolos de porcentagem mássica.

Tabela 3 – Componentes da análise elementar de um sólido.

Componente	Símbolo (% mássica)
Carbono	w_C
Hidrogênio	w_H
Oxigênio	w_O
Nitrogênio	w_N
Enxofre	w_S
Cinzas	w_{Cinzas}
Umidade	$w_{umidade}$

Em um processo de oxidação completa de uma matéria carbonácea sólida, a estequiometria é dada pela seguinte forma:



Pode ser observado que o carbono é tomado como tendo um coeficiente estequiométrico igual a um na composição do sólido. Logo os coeficientes a_i de cada outro componente (ex. a_H sendo o coeficiente do hidrogênio) são definidos como:

$$a_i = \frac{w_i M_C}{w_C M_i} \quad (3)$$

sendo M_i a massa molecular do componente i .

Considerando um agente gaseificador com X porcentagem de oxigênio (ex. Ar – $X \cong 21$), a quantidade de mols deste gás necessária para completa combustão do material sólido é:

$$N_{gás} = \frac{100}{X} \left(1 + \frac{a_H}{4} - \frac{a_O}{2} + \frac{a_N}{2} + a_S\right) \quad (4)$$

Logo a massa molar desse gás será, caso seja composto única e exclusivamente de O_2 e N_2 :

$$M_{gás} = \frac{X}{100} * 2 * M_O + \left(\frac{1-X}{100}\right) * 2 * M_N \quad (5)$$

Já a massa molar do combustível é:

$$M_{combustível} = \sum a_i M_i \quad (6)$$

tal que a_C é 1.

A razão gás/combustível teórica para uma combustão completa, considerando um mol de combustível, é, portanto, dada por:

$$F_{gás-est} = \frac{N_{gás}}{1} \frac{M_{gás}}{M_{combustível}} \quad (7)$$

Com isso, a razão estequiométrica RE é definida por:

$$RE = \frac{F_{gás-real}}{F_{gás-est}} \quad (8)$$

Para se calcular a vazão de gás, Q_{O_2} , a ser utilizada em um processo de gaseificação com, por exemplo, Q_B de vazão de biomassa, o cálculo será o seguinte:

$$Q_{O_2} = RE * F_{gás-est} * Q_B \quad (9)$$

Nos processos de gaseificação, a razão estequiométrica varia entre 20% e 35%.

Capítulo III. Reatores Empregados no Processo

Em geral, os reatores são classificados como sendo de leito fixo ou móvel, de leito fluidizado ou de arraste (Castellanos, 2012). A Figura 4 apresenta um esquema com cada tipo de reator.

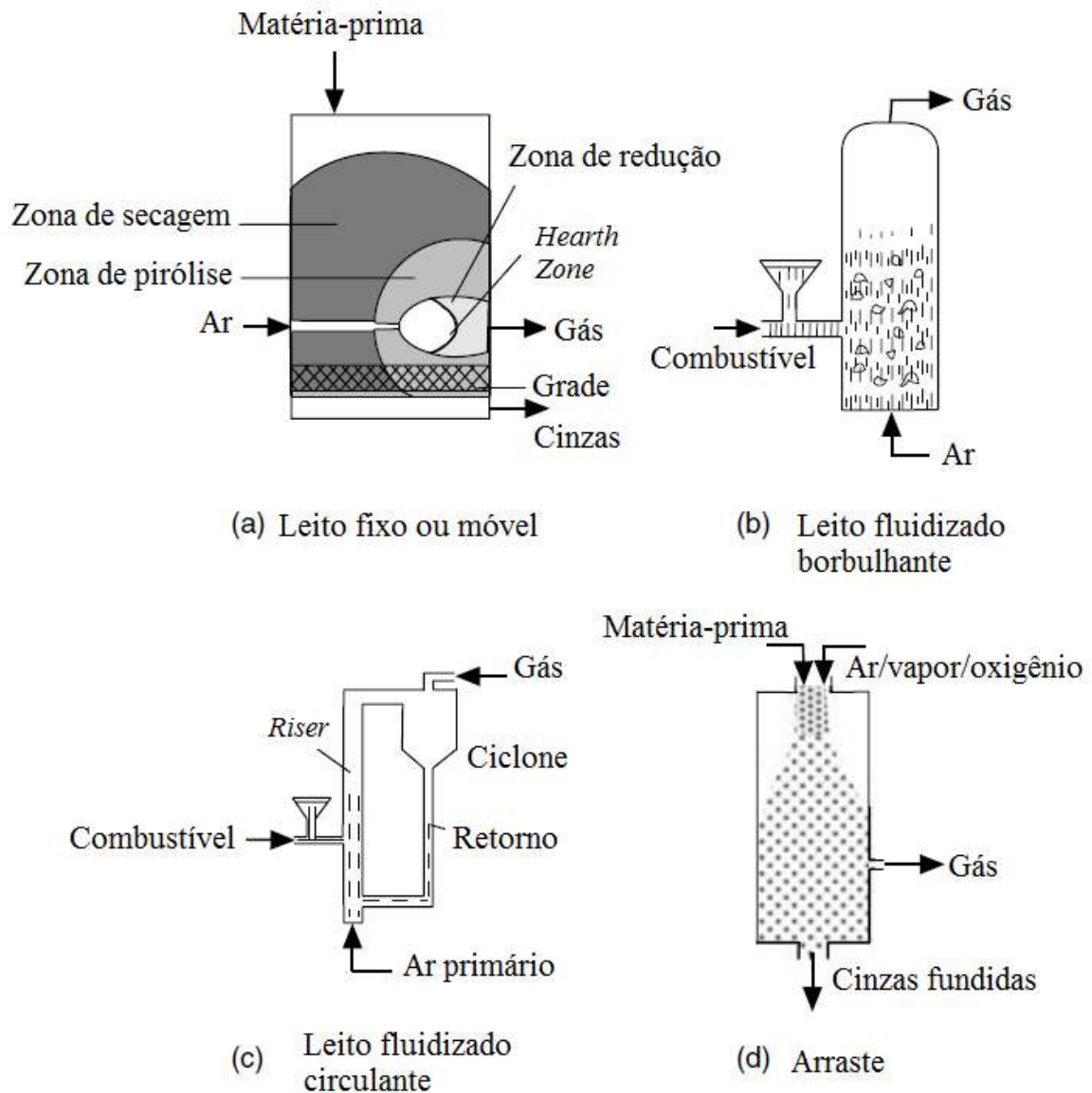


Figura 4 – Diferentes tipos de reatores (adaptado de (Basu, 2006)).

III.1. Leito fixo ou móvel

No reator de leito fixo ou de leito móvel, Figura 4.a, o agente gaseificador entra em contato com as partículas da matéria-prima sólida disposta fixa no leito do reator. Esse tipo de reator pode ser classificado de acordo com a orientação do fluxo do agente gaseificador em relação ao leito.

- Fluxo ascendente (Figura 5)
- Fluxo descendente
- Fluxo lateral (Figura 4.a)

O gaseificador de leito fixo ou móvel possui duas zonas: zona de combustão e gaseificação de mistura sólido-gás.

Na Figura 5 está esquematizado o funcionamento de um reator de leito fixo/móvel com fluxo ascendente. A matéria é devolatilizada em uma zona separada e somente carvão puro (carbonizado) sofre gaseificação. A zona mais baixa é onde ocorre a combustão do carbonizado e há geração de energia para as zonas superiores, onde ocorrem as reações endotérmicas do processo, que por sua vez geram o carbonizado para a zona inferior.

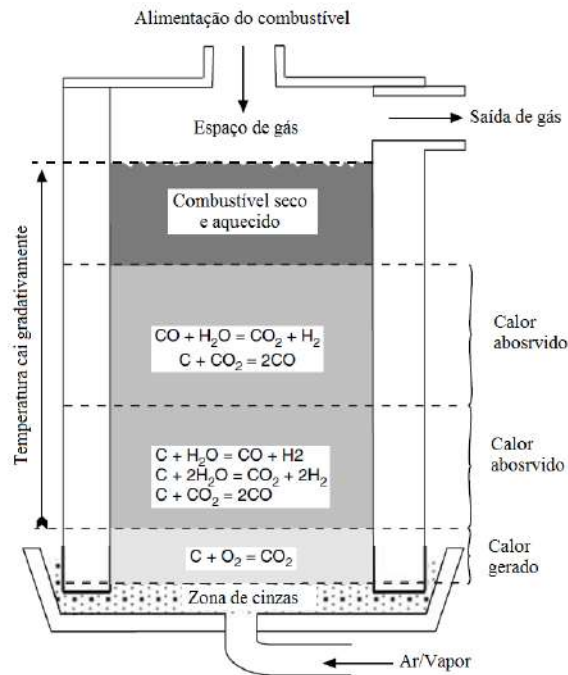


Figura 5 – Reator de leito fixo/móvel (adaptado de (Basu, 2006)).

III.2. Leito fluidizado

O reator de leito fluidizado possui duas configurações básicas. Pode ser tanto com leito borbulhante como de leito circulante. Em Anthony (2005) pode ser observado o estudo desses diferentes reatores para o processo de combustão, em especial o de leito borbulhante.

Em um reator de leito fluidizado, o sólido é gaseificado em um leito de pequenas partículas, onde o agente gaseificador é responsável pela fluidização do meio.

A Figura 6 mostra um reator de leito fluidizado borbulhante. Neste tipo de reator o gás produzido é prontamente retirado para ser tratado.

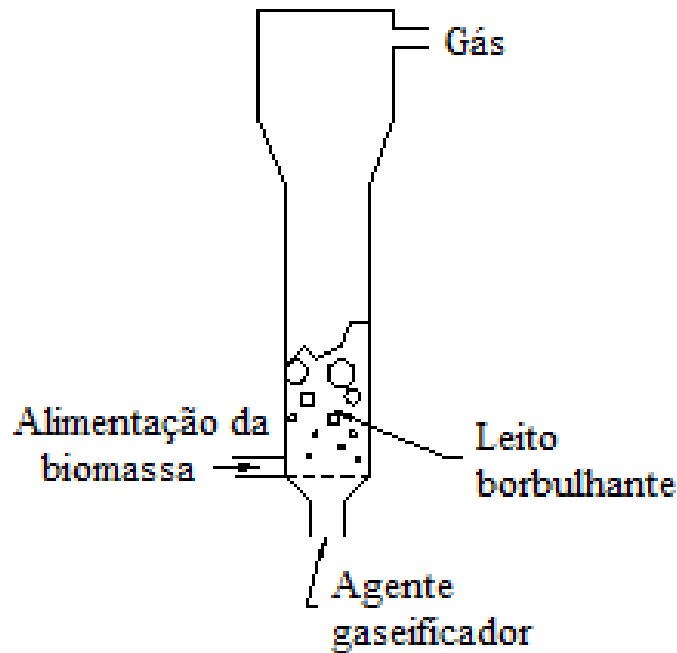


Figura 6 – Reator de leito fluidizado borbulhante (adaptado de (Geldart, 1986)).

No esquemático exibido na Figura 7 pode ser observado um reator de leito fluidizado circulante. A diferença prontamente percebida é o tipo de regime de fluidização do meio.

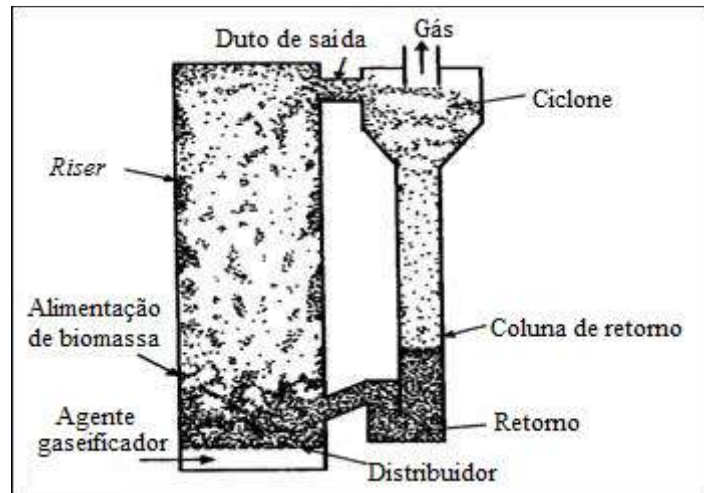


Figura 7 – Reator de leito fluidizado circulante (Yang, 2003).

A principal variável para obter uma boa operação desses tipos de reatores é a velocidade dos gases de entrada do sistema, de forma a permitir fluidização adequada do leito. A diferença básica entre o reator de leito fluidizado borbulhante e o circulante, como dito anteriormente, está no regime de fluidização, em que no primeiro o regime é de fluidização borbulhante, ao passo que no segundo é um regime de fluidização rápida, com o qual há arraste de partículas sólidas do leito, que são recirculadas. A Figura 8 exemplifica os diferentes regimes de fluidização.

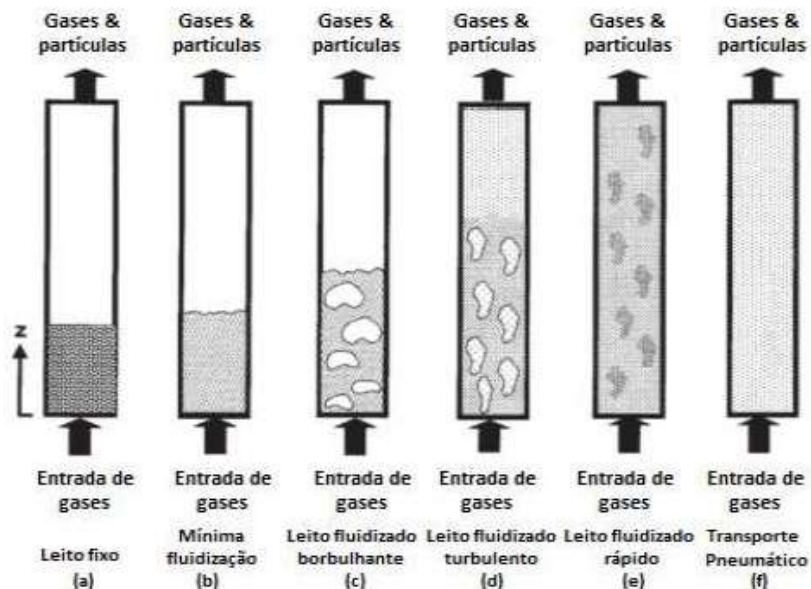


Figura 8 – Diferentes estados de um leito de partículas (adaptado de (Souza-Santos, 2010)).

Dessa forma, é desejável realizar a operação com uma vazão dos gases de entrada, os agentes gaseificadores, de forma a se obter a fluidização desejada.

III.3. Arraste

No reator de arraste, as partículas do combustível sólido precisam estar pulverizadas. A gaseificação ocorre no leito do reator, de forma que essas partículas se encontram suspensas na corrente do agente gaseificador. As cinzas se fundem em altas temperaturas de operação e são removidas na forma de escória líquida (Basu, 2006).

Capítulo IV. Metodologia de Estudo

No presente capítulo, será apresentado o *software* utilizado para realizar as simulações, assim como a modelagem, o planejamento experimental proposto e a metodologia utilizada para o estudo da gaseificação do bagaço de cana em um leito fluidizado de forma a obter dados suficientes para propor modelos para as respostas do processo.

IV.1. Modelagem do processo

Antes de se falar no simulador, é preciso entender um pouco melhor sobre a modelagem do processo de gaseificação. No presente tópico serão apresentadas algumas abordagens feitas na literatura sobre a modelagem do problema.

O processo de gaseificação é muito complexo e de difícil modelagem matemática, baseando-se nas reações químicas, taxas reacionais, transferência de massa, etc. São muitos os fenômenos ocorrendo no processo. Corella & Sanz (2005) destacaram a dificuldade de se fazer um modelo baseado nas equações cinéticas das diferentes reações envolvidas junto com os balanços de massa e energia para um gaseificador de biomassa de leito fluidizado circulante.

Os diferentes modelos podem ser classificados em termos das equações empregadas, se fundamentais, gerando modelos fenomenológicos, ou baseados em correlações, produzindo modelos ditos empíricos ou semi empíricos (ou híbridos). Outras subclassificações dizem respeito ao uso da variável tempo (modelos estacionários ou dinâmicos) ou de acordo com o número de dimensões espaciais consideradas no modelo (0D, 1D, 2D, 3D) (de Souza Jr. & Trica, 2013; Souza-Santos, 2010).

Em Hammel & Krumm (2001), o processo de gaseificação foi modelado utilizando um reator de leito fluidizado borbulhante. O modelo levou em consideração a cinética química envolvida, dinâmica e modelos matemáticos. Testou-se uma variedade de operações, usando diferentes agentes gaseificadores, ar, ar/vapor ou O₂/vapor, com diferentes razões estequiométricas, e também utilizando diferentes combustíveis, como carvão marrom, turfa e serragem.

Um estudo realizado por Kaushal et al. (2010) apresenta um modelo unidimensional em estado estacionário de gaseificação em duas fases em reator de leito

fluidizado borbulhante baseado nas cinéticas reacionais globais, balanços de massa e energia, e sendo possível obter o perfil de temperatura do sólido e do gás no reator ao longo do eixo principal. Além de prever esse perfil de temperaturas, o modelo também é capaz de prever rendimento de alcatrão, composição do produto gasoso, HHV e taxa de produção.

Um modelo bidimensional foi proposto por Costa & Souza-Santos (1999). Leva em consideração o movimento de circulação das partículas no leito, viscosidade aparente do meio. Apresenta métodos computacionais para a solução dos problemas de gaseificação e propõe, mesmo utilizando uma modelagem bastante simples, chegar a resultados semelhantes a equações semi empíricas existentes sem aumentar o tempo de computação dos dados.

Como exemplo de modelagem empírica, pode-se citar aquela que utiliza redes neurais artificiais (RNA). Existem trabalhos na literatura utilizando RNA que predizem características de processos de combustão, pirólise ou gaseificação. Por exemplo, Guo et al. (1997) desenvolveram um modelo híbrido para gaseificação de carvão usando redes neurais para estimar parâmetros de reatividade dos diferentes tipos de carvão com razoável sucesso. Já em Dong et al., (2002), foram utilizadas RNA para predizer a emissão de gases poluentes em um processo de combustão de uma mistura de resíduos sólidos urbanos e carvão com resultados próximos aos dados experimentais. Em de Souza Jr. et al. (2012), o processo é modelado utilizando RNA e um banco de dados compilado da literatura de resultados de processos utilizando biomassa. A correlação entre a composição do gás produzido e as características das diferentes biomassas e condições operacionais foi investigada e o modelo foi utilizado para maximizar a produção de determinado componente.

IV.2. CeSFaMB™

O CSFMB© ou CeSFaMB™ (*Comprehensive Simulator of Fluidized and MovingBed Equipment*), segundo a sua designação comercial atual (conhecido anteriormente como CSFB), começou a ser desenvolvido no ano de 1987 como um programa de simulação de processos de combustão e gaseificação em leitos fluidizados

(Souza-Santos, 1987). Ele é baseado na aplicação das equações de conservação de massa, calor e quantidade de movimento para uma dimensão em um leito fluidizado.

Para uma melhor compreensão do programa utilizado, será exposto a seguir o seu funcionamento. Todos os principais dados de entradas serão explanados, assim como os dados de saída (resultados). Para um maior detalhamento de todos os recursos do programa, o manual do *software* deve ser consultado (Souza-Santos, 2012).

IV.2.1.Dados de entrada (*Input*)

Os dados de entrada requeridos pelo CeSFaMB™ para simular um caso de gaseificação em leitos fluidizados borbulhantes podem ser classificados em três categorias, parâmetros de convergência numérica, dados de entrada geométricos e físicos do reator e caracterização de gases e sólidos (Castellanos, 2012). A seguir é feita uma breve descrição dos dados de entrada mais importantes para a simulação de gaseificadores de leito fluidizado. Uma descrição detalhada de todos os dados de entrada do CeSFaMB™ é feita em Souza-Santos (2012).

IV.2.1.1. Parâmetros de convergência numérica

Os primeiros parâmetros a se definir em uma simulação utilizando o CeSFaMB™ são os parâmetros de convergência numérica; eles vão definir as rotas matemáticas, critérios de convergência, número de iterações, etc. São fundamentais para a avaliação da convergência do procedimento numérico e avaliação da representação do sistema físico.

Os parâmetros mais importantes definem o intervalo de busca da solução, o desvio máximo permitido na solução, a tolerância máxima permitida para a integração numérica, a forma de determinar a região de devolatilização no leito, o método de integração das equações diferenciais e o método para solução das equações diferenciais não lineares (Castellanos, 2012).

A Figura 9 exemplifica a tela inicial da interface do programa. Esta tela representa a etapa da inserção dos dados discutidos anteriormente.

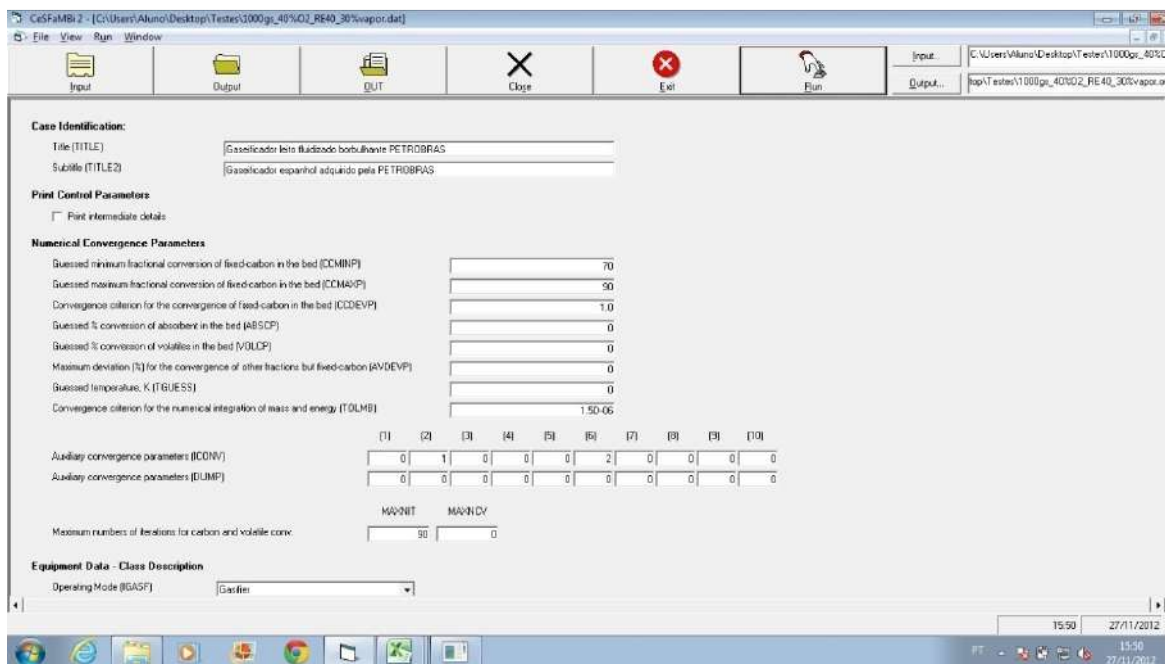


Figura 9 – Tela de interface do CeSFaMB™

- CCMINP e CCMAXP: são os parâmetros relativos à conversão de carbono fixo da fase sólida para a fase gasosa, mínimo e máximo, respectivamente. Esses parâmetros são definidos em conjunto, pois é dentro do intervalo entre eles que há a convergência da simulação. As estimativas iniciais do algoritmo para iniciar a simulação são dadas utilizando o CCMINP e depois o CCMAXP, e verifica-se se a convergência estará entre esses valores, caso não esteja, a convergência não será alcançada e a simulação é cancelada. Por isso a definição desses parâmetros é de suma importância. Intervalos curtos podem acarretar em menos interações, porém podem também comprometer a convergência (Souza-Santos , 2012).
- Máximo desvio permitido para a convergência de conversão de carbono fixo no leito (CCDEVP): este parâmetro define o critério estabelecido para a convergência da simulação, ou seja, o critério de parada. É a diferença entre o valor da conversão de carbono fixo utilizado nos cálculos iterativos e o valor calculado ao final dessas iterações. Valores muito baixos geram simulações mais precisas, porém podem aumentar consideravelmente o tempo de simulação ou até a sua não convergência (Souza-Santos, 2012).

- Critério de convergência para a integração numérica dos balanços de massa e energia (TOLMB): este parâmetro é semelhante ao anterior, porém é relativo a cada iteração dos métodos matemáticos para os cálculos realizados na simulação. Por exemplo, para se calcular a conversão de carbono fixo, utiliza-se um valor inicial e pelas equações do processo e algoritmos do programa, realizam-se várias iterações com métodos matemáticos, e o critério de cada método é o TOLMB. Assim como o CCDEVP, valores menores aumentam a precisão, porém aumentam o tempo de cada simulação.
- Fatores de convergência ICONV e DUMP: é uma série de fatores que definem os métodos numéricos e como se dará o processo. Valores típicos e maiores detalhes são explicitados em Souza-Santos, 2012.

A Tabela 4 demonstra os valores típicos utilizados para esses parâmetros nas simulações do presente trabalho. TOLMB E DUMP foram normalmente 0; valores diferentes estão especificados na tabela. Em algumas simulações, em que havia dificuldades para atingir a convergência, alguns desses parâmetros foram alterados.

Tabela 4 – Parâmetros de convergência.

CCMINP	10
CCMAXP	90
CCDEVP	1.0
TOLMB	1.0D-06
ICONV(2)	1
ICONV(6)	2

IV.2.1.2. Geometria do equipamento

Neste momento, são definidos o tipo de equipamento utilizado, suas dimensões, características físicas e seus acessórios. É muito importante conhecer bem o equipamento utilizado, pois divergências de informações podem levar a resultados incoerentes com o equipamento previsto.

Além disso, o programa permite definir o tipo de processo, no caso do presente trabalho foi utilizada a gasificação em reator de leito fluidizado borbulhante. Pode-se também realizar simulações utilizando Caldeiras, fornos ou incineradoras, retortas de xisto ou processos de pirólise.

Na Figura 10 pode-se observar a relação de parâmetros do programa com as dimensões e posições do equipamento utilizado no presente trabalho, um reator de leito fluidizado.

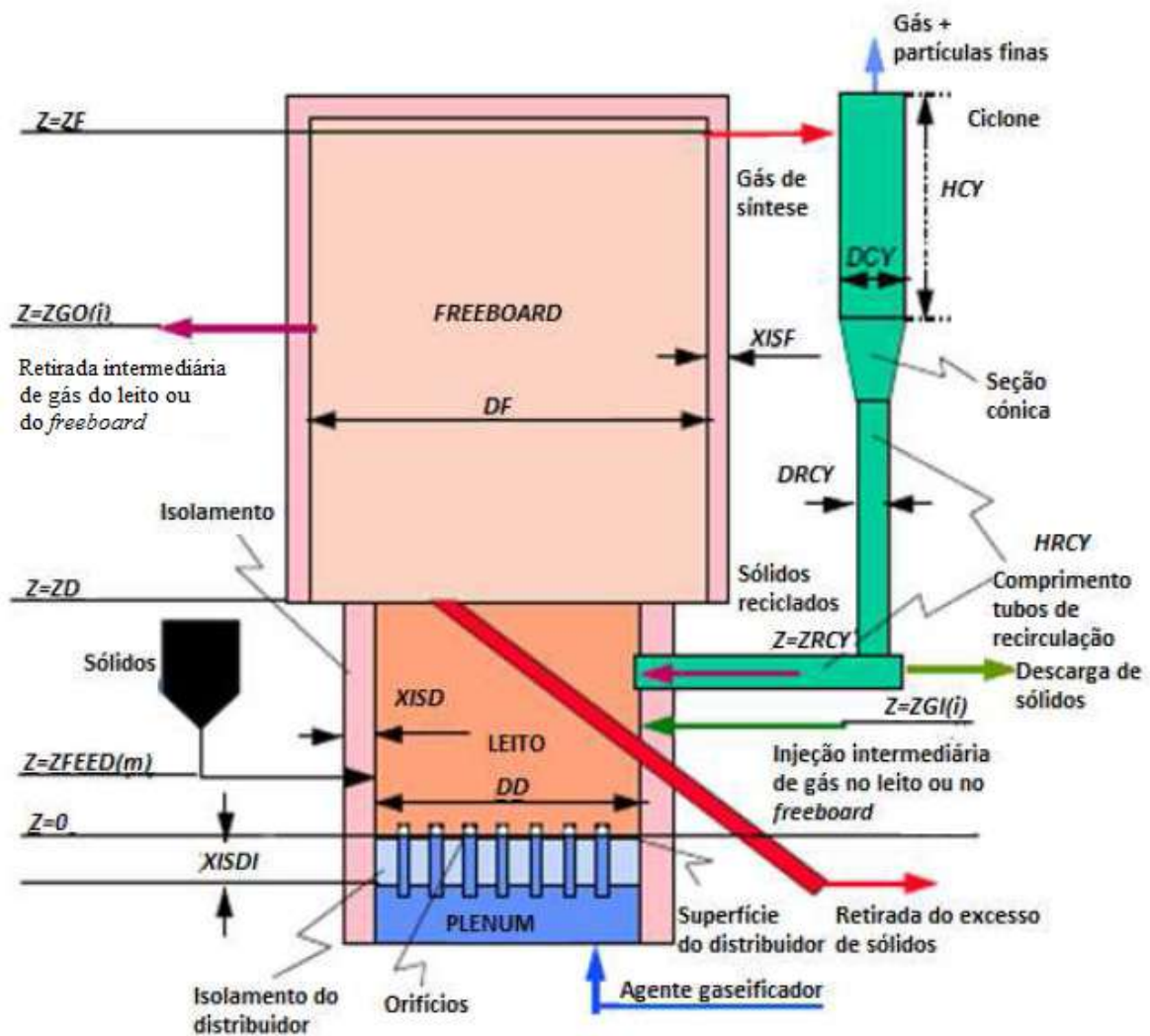


Figura 10 – Esquema de um reator de leito fluidizado (Castellanos, 2012).

Na Figura 10 se observa as principais características do equipamento necessárias para as simulações, por exemplo, as dimensões do *freeboard*, leito e da placa distribuidora são fundamentais para a operação do reator, enquanto o ciclone é item opcional. Nessa

figura, os diâmetros do *freeboard* e do leito estão representados como DF e DD respectivamente. No programa é possível modelar a forma do equipamento. São utilizados dois parâmetros: DIAME(I) e ZPOSE(I). Com estes parâmetros é possível definir o diâmetro a cada intervalo de posição z em metros, ou seja, $z = 0$ é a posição na altura da placa distribuidora e $z > 0$ a posição acima da placa. Por exemplo, na figura DIAME seria DD com ZPOSE de 0 a ZD e DF de ZD a ZF. Para obter uma geometria cônica, é preciso definir um intervalo entre o leito e o *freeboard*, ou seja, ZD teria que ser dividido em ZD1 e ZD2, de forma que o diâmetro aumentaria de DD a DF neste intervalo de altura, exemplificado na Figura 11.

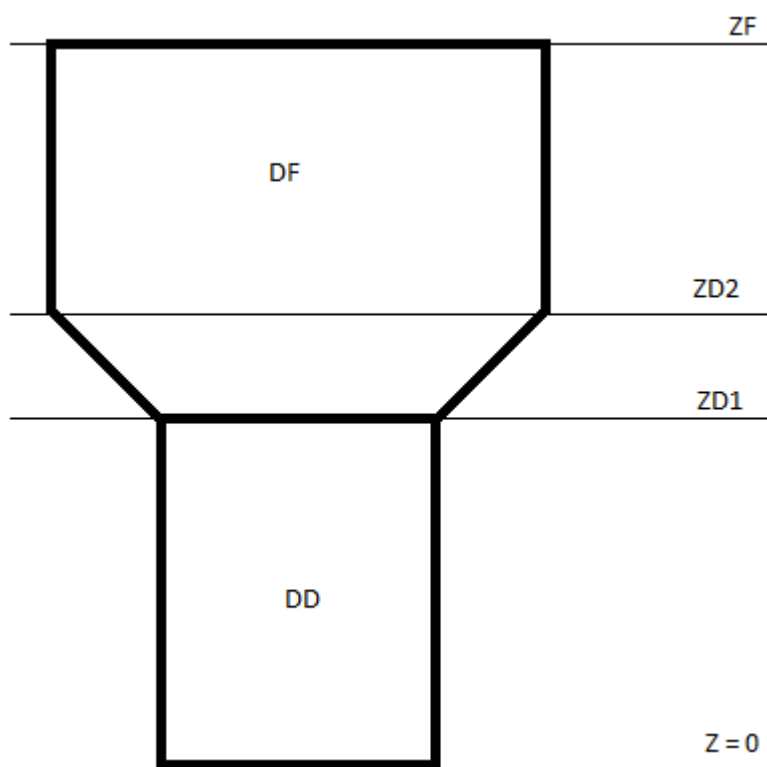


Figura 11 – Esquema de reator de leito fluidizado – Geometria cônica

Desta forma, é possível modelar o equipamento com a forma desejada.

Também deve ser definido o tipo de placa, porosa ou de orifícios, e suas respectivas características. Outros parâmetros também são importantes, como espessura das paredes, condutividade térmica e emissividade do ambiente. Além disso, aquecimento térmico externo também é possível ser admitido. Com estes parâmetros, podem-se definir as perdas

de calor para o ambiente e também a quantidade de calor fornecida para o sistema por fontes externas.

O sistema utilizado no presente trabalho foi um sistema tentando se aproximar de um gaseificador em escala piloto típico. Os dados também se baseiam na referência de Castellanos (2012).

Os dados utilizados nas simulações do presente trabalho estão dispostos na Tabela 5. Foi selecionada gaseificação em reator de leito fluidizado borbulhante com seções cilíndricas.

Tabela 5 – Parâmetros do equipamento.

Diâmetro DIAME(1)	0,0828 m	Diâmetro DIAME(2)	0,0828 m
Diâmetro DIAME(3)	0,1345 m	Diâmetro DIAME(4)	0,1345 m
Posição ZPOSE(1)	0 m	Posição ZPOSE(1)	0,585 m
Posição ZPOSE(1)	0,897 m	Posição ZPOSE(1)	1,052 m
Altura do leito ZD	0,585 m	Posição de retirada ZF	1,052 m
Porosidade da placa EPPP	0,3 m	Diâmetro médio dos poros da placa DPOR	1,5D-4 m
Espessura interna do leito XISD(1)	0,003048 m	Espessura externa do leito XISD(2)	0,137 m
Condutividade térmica interna do leito AKISD(1)	18,7 W/(m.K)	Condutividade térmica externa do leito AKISD(2)	0,0035 W/(m.K)
Espessura interna do <i>freeboard</i> XISF(1)	0,003404 m	Espessura externa do <i>freeboard</i> XISF(2)	0,111 m
Cond. térmica interna do <i>freeboard</i> AKISF(1)	18,7 W/(m.K)	Cond. térmica externa do <i>freeboard</i> AKISF(2)	0,0035 W/(m.K)
Espessura da placa distribuidora XISDI(1)	0,185 m	Cond. térmica da placa distribuidora AKISDI(1)	18,7 W/(m.K)

Não foi considerado nenhum tipo de aquecimento/fornecimento de calor externo para as simulações, apesar de unidades pilotos típicas possuírem aquecimento do leito e do

freeboard com fornalhas. Isto será mais bem explicado mais a frente, quando o planejamento, metodologia e as simulações estiverem sendo definidos.

IV.2.1.3. Dados do processo

O processo de gaseificação possui duas principais correntes, a do agente gaseificador, que pode ser uma combinação de ar + vapor d'água ou O₂ puro, etc., e a corrente de alimentação do combustível, ou fonte de carbono, que no caso deste trabalho é o bagaço de cana-de-açúcar.

O CeSFaMBTM permite ao usuário especificar cada uma dessas correntes. São elas que realizarão, por assim dizer, o processo da gaseificação. Portanto é preciso caracterizá-las. Além disso, o programa também permite a alimentação de até 5 combustíveis sólidos diferentes.

As correntes gasosas do processo são definidas quanto a sua composição, vazão, temperatura e pressão, podendo também ser alimentadas juntas correntes de um gás com composição definida e vapor d'água.

A caracterização da corrente sólida, neste caso o bagaço de cana, é um pouco mais complicada, pois é preciso ter um conhecimento de diversas características. É preciso definir sua distribuição do tamanho de partículas, esfericidade, forma, composição por meio da análise elementar, análise imediata, poder calorífico superior, posição da alimentação (em relação à placa, onde $z = 0$), densidades das partículas e sua vazão e temperatura.

Além dessas correntes do processo, é possível também definir correntes sólidas de inerte e absorventes, com as mesmas necessidades de especificações da corrente de combustível sólido. Também se devem definir as condições ambientais, como temperatura e velocidade do vento, cujos dados utilizados estão na Tabela 6.

Tabela 6 – Condições ambientais.

Temperatura ambiente	308 K
Velocidade do vento	2 m/s

Foram utilizados no presente trabalho os dados das correntes sólidas de acordo com Castellanos (2012). A vazão da corrente de bagaço de cana foi considerada fixa e o motivo para isto será melhor explicado mais a frente quando será detalhado o planejamento experimental. Enquanto isso, as correntes gasosas de entrada, vapor d'água e gás contendo O₂, foram variadas para cada simulação e serão detalhados mais a frente. Esses dados relativos às correntes sólidas estão dispostos nas Tabelas 7, 8 e 9.

Tabela 7 – Características do bagaço da cana (Castellanos, 2012).

ANÁLISE IMEDIATA	
Componente	%
Umidade	4,26
Voláteis	77,99
Carbono fixo	11,03
Cinzas	6,72
ANÁLISE ELEMENTAR	
Elemento	%
Carbono	47,63
Hidrogênio	6,16
Nitrogênio	0,42
Oxigênio	38,46
Enxofre	0,31
Cinzas	7,02
PODER CALORÍFICO SUPERIOR (MJ/kg)	
HHV	16,73
VAZÃO DO BAGAÇO DE CANA (kg/s)	
2,22D-4	

Tabela 8 - Distribuição de tamanho de partícula para o bagaço de cana (Castellanos, 2012).

NÚMERO DE MALHA	FRAÇÃO MÁSSICA RETIDA
10	0,005
18	0,005
35	0,830
60	2,100
120	43,170
230	31,000
400	22,890

Tabela 9 - Distribuição de tamanho de partícula para o material do leito (Castellanos, 2012).

TAMANHO DE ABERTURA DA PENEIRA (MM)	FRAÇÃO MÁSSICA RETIDA
0,000	0,01
0,045	9,93
0,120	16,14
0,175	12,05
0,250	19,59
0,3625	15,98
0,463	6,40
0,550	7,03
0,725	9,73
0,850	3,14

Além disso, é preciso também definir outros parâmetros para os sólidos. Como esses dados não são conhecidos, foram utilizados dados padrões para o bagaço de cana do programa CeSFaMBTM, como mostrado a seguir:

Tabela 10 - Valores do CeSFaMBTM para o bagaço de cana e o material inerte (Castellanos, 2012).

Forma das partículas	Bagaço de cana	Material inerte
	Esférica	Esférica
Esfericidade	0,7	0,98
Massa específica total (kg/m³)	200	2000
Massa específica aparente (kg/m³)	720	3563
Massa específica real (kg/m³)	1394	3564

IV.2.2.Dados de saída do programa (*Output*)

Ao concluir uma simulação no CeSFaMB™, o usuário precisa tomar conhecimento dos resultados de sua simulação. Para isso, o programa possui uma interface que permite ao usuário visualizar todos os resultados disponíveis, seja em gráficos ou tabelas. Segue-se, para fins de ilustração, uma sequência de figuras (Figura 12, Figura 13, Figura 14 e Figura 15) com algumas telas de visualização de resultados.

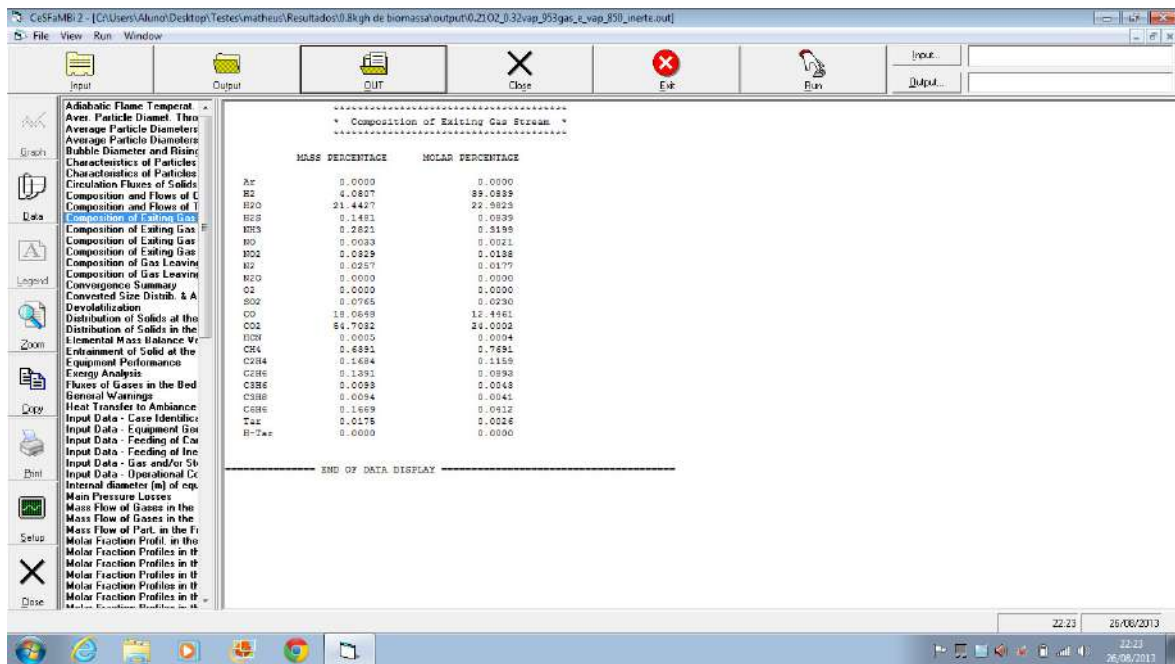


Figura 12 – Tela de resultados CeSFaMB™ – Tabela de composições.

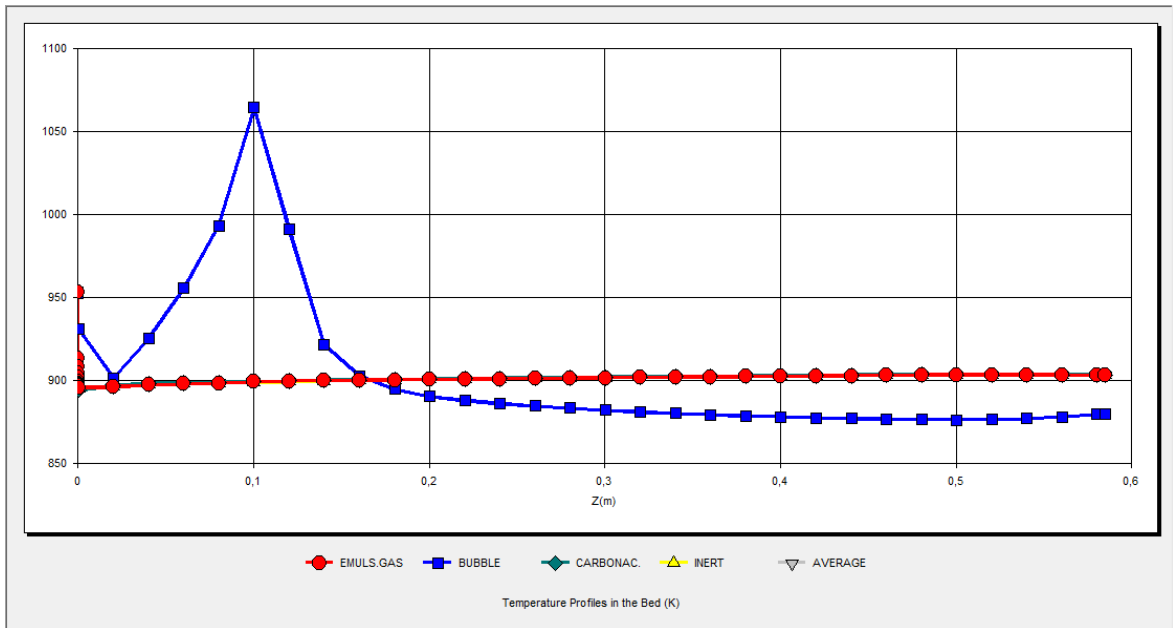


Figura 13 – Tela de resultados CeSFaMB™ – Perfil de temperatura.

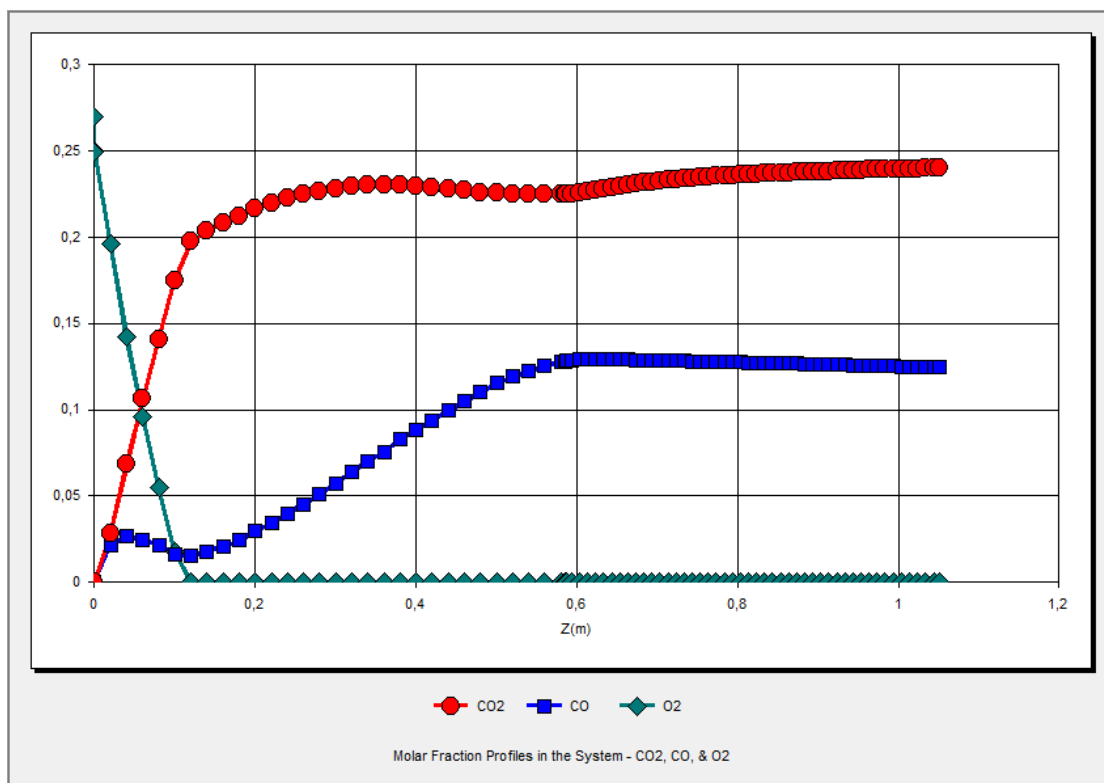


Figura 14 – Tela de resultados CeSFaMB™ – Perfil de composição.

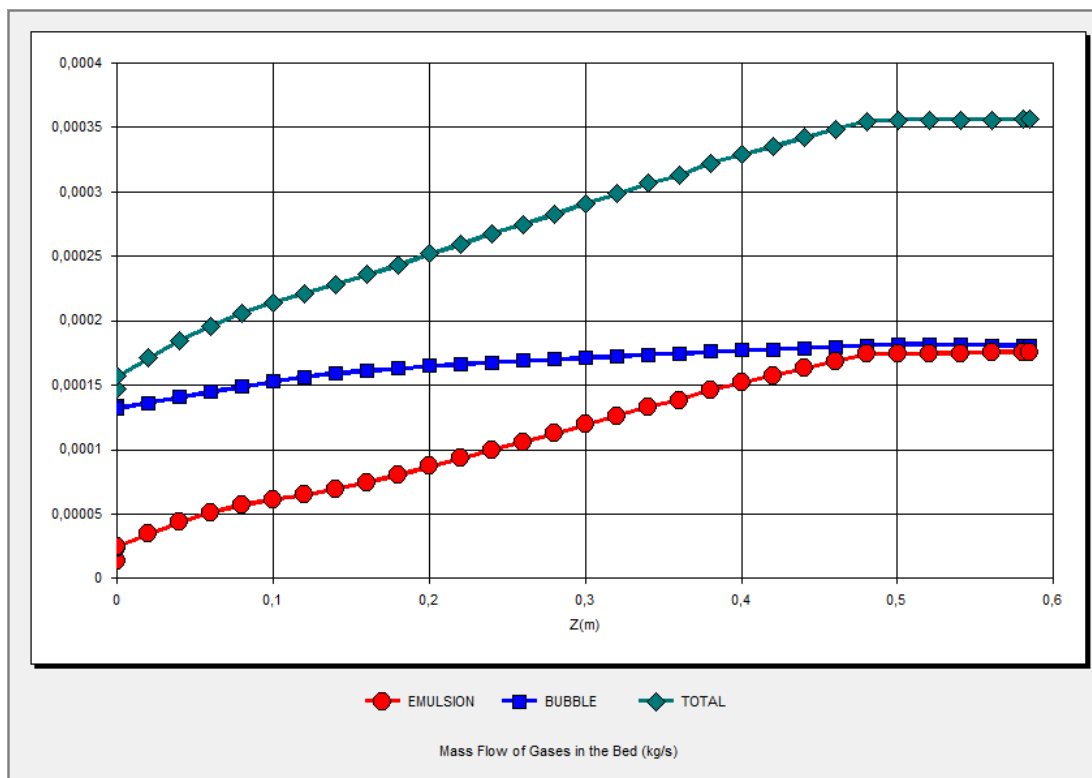


Figura 15 – Tela de resultados CeSFaMB™ – Perfil de vazões mássicas.

A partir da obtenção dos resultados completos, foi possível extrair e dispor em planilhas de Excel todos os resultados de interesse das simulações realizadas, de forma a facilitar as análises posteriormente discutidas.

IV.2.3. Algoritmo de solução do modelo

Para se chegar aos resultados previamente mostrados através dos dados de entrada também discutidos, o programa realiza e soluciona um sistema de equações através de uma série de cálculos iterativos e segue um procedimento como descrito por Castellanos (2012). A seguir se encontra descrito esse procedimento:

- Leitura dos dados de entrada numéricos, geométricos e físicos do equipamento e de caracterização dos gases e sólidos.
- Para a primeira iteração feita pelo programa, o valor da porcentagem mínima de carbono fixo (CCMINP), explicado anteriormente, é utilizado para calcular porcentagens de conversão de outros componentes no combustível sólido.

- Com os valores de conversão de componentes no combustível sólido é calculada a distribuição do tamanho de partículas em regime permanente utilizando o modelo de reação heterogênea e de arrasto.
- Partindo dos dados de entrada e do cálculo da distribuição de tamanho de partículas em regime permanente, são estabelecidas as condições de contorno, em $z=0$ para os gases e os sólidos, utilizadas para resolver os balanços de massa e energia.
- O sistema não linear de equações diferenciais é resolvido para o leito, ou seja, desde $z=0$ até $z= ZD$.
- Depois de resolver os balanços de massa e energia no leito, calcula-se o valor de conversão de carbono fixo no combustível sólido e se compara com o valor dado em CCMINP. Se o valor calculado for maior, então o programa passa para a segunda iteração. Se o valor for menor, o programa para e pede para introduzir um novo valor para CCMINP, que deve ser menor do que o utilizado.
- Os seis passos anteriores são repetidos utilizando o valor de CCMAXP para calcular a distribuição de tamanho de partículas no leito. Se o valor de conversão de carbono fixo calculado for menor que o valor de CCMAXP, então o programa assume um novo valor intermediário de conversão de carbono fixo, entre CCMINP E CCMAXP, e começa uma nova iteração. Se o valor calculado for maior, o programa para e pede para introduzir um novo valor para CCMAXP, que deve ser superior ao utilizado.
- O processo anterior é repetido até que o valor de desvio entre a conversão calculada e a suposta, ou seja, a última que o programa assumiu, seja menor que o valor especificado para o parâmetro CCDEVP.
- Os valores de temperatura, fluxos e composições no topo do leito ($z = ZD$) são utilizados como condições de contorno para resolver os balanços diferenciais de massa e energia no *freeboard*.
- Os resultados finais são impressos.

IV.3. Planejamento experimental (Plano de simulações)

Será abordado neste item o planejamento experimental realizado para o presente trabalho.

IV.3.1. Avaliação qualitativa

Para fazer um planejamento experimental, primeiramente é preciso listar as variáveis do sistema, as quais algumas já foram detalhadas anteriormente, para assim fazer uma avaliação qualitativa de quais variáveis influenciam o processo de forma mais vigorosa. Assim segue-se com a listagem.

- Correntes de entrada
 - Biomassa (bagaço de cana)
 - Vazão de sólido
 - Granulometria
 - Composição
 - Teor de umidade
 - Temperatura
 - Vapor
 - Vazão (QS)
 - Temperatura
 - Gás
 - Composição (O₂, ar, N₂ ou misturas destes)
 - Vazão (QO₂)
 - Temperatura

- Reator
 - Tipo de leito
 - Dimensões e geometria
 - Temperatura do *set-point* (controlada com aquecimento do reator)
 - Temperatura do leito
 - Temperatura do *freeboard*
 - Variação de pressão entre a base do reator e o topo do *freeboard* (ΔP)
 - Agente de fluidização/catalisador
 - Granulometria
 - Características físico-químicas

- Sistema de separação
 - Vazão mássica de gás produzido
 - Vazão mássica de cinzas
 - Vazão mássica de água
 - Teor de alcatrão
 - Teor de H₂
 - Teor de CO
 - Teor de CO₂
 - Teor de CH₄

Existem diversos estudos na literatura sobre a avaliação qualitativa da relevância das variáveis listadas, porém muitos destes estudos são realizados com as variáveis de

forma isolada, ou seja, de uma a uma, sem que a interação entre duas ou mais no processo seja avaliada. Desta forma é preciso fazer um estudo levando em consideração as variáveis do processo concomitantemente.

É preciso reduzir o número de variáveis a serem investigadas para que o planejamento experimental seja viável. Com isto, para um planejamento de uma análise de efeitos do processo, pode ser definido que algumas das variáveis sejam fixas. Neste caso serão usadas uma biomassa (bagaço de cana) definida (temperatura, granulometria, composição e teor de umidade), agente de gaseificação com temperaturas fixas, sendo O₂ puro e vapor d'água, e a unidade de gaseificação já definida, como sendo a planta piloto estabelecida anteriormente neste texto. Portanto, reduz-se consideravelmente o número de variáveis a serem investigadas. Tem-se, portanto, as variáveis das correntes de entrada e a temperatura do *set-point* como variáveis a serem investigadas. Enquanto que os efeitos a serem analisados serão as variáveis de saída do processo, ou seja, as temperaturas efetivas do leito, do *freeboard*, a queda de pressão no leito e as variáveis do sistema de separação.

Como já descrito em seção anterior, todas as variáveis do processo que foram consideradas fixas foram definidas, restando assim as variáveis a serem investigadas: vazão de biomassa, vazão de O₂, vazão de vapor d'água e a temperatura do *set-point* (Ts). De acordo com Kumar et al., (2009) e Wu et al., (2012). Essas variáveis podem ser agrupadas, gerando razões. As vazões de biomassa e O₂ podem ser especificadas como RE, descrita no Capítulo IV. Além disso, a vazão de biomassa também pode ser utilizada para especificar a vazão de vapor d'água como uma razão entre vapor e biomassa, doravante denominada S/B. Com isso, têm-se três variáveis independentes do processo com as quais poderá ser feito o planejamento experimental, RE, S/B e Ts.

O artifício de se usar razões entre as variáveis de entrada, de forma a adimensioná-las, é frequente em análises de processo, já que reduz o número de variáveis a investigar, facilitando assim a manipulação das informações resultantes em escala laboratorial para aumento de escala. Entretanto, o uso destas transformações de variáveis medidas na análise de efeitos independentes é um problema, pois os erros das razões são sempre maiores que aqueles observados para cada uma das variáveis independentemente (Coetzer & Keyser, 2003) (Pérez, Megar, & Benjumea, 2012).

IV.3.2. Variáveis independentes

Através da avaliação qualitativa, foram definidas as variáveis que serão investigadas no presente trabalho. Foram identificadas quatro variáveis, porém com a definição das razões explicadas anteriormente, têm-se apenas três.

O uso das razões RE e S/B não é aconselhado na análise de efeitos, visto que quaisquer efeitos que tenham a presença de variáveis suscetíveis a incertezas maiores, como a vazão de bagaço de cana, por hipótese, apresentarão incertezas no mínimo iguais à maior incerteza. O uso destas razões, porém, é muito útil na avaliação de limites para as variáveis do plano. Visto que tais limites devem ser estabelecidos de acordo com o aprendizado desenvolvido em experimentos prévios de gaseificação desta biomassa, conforme apresentado em (2013), é recomendada a operação da planta nas faixas apresentadas na Tabela 11:

Tabela 11 – Faixa de operação – Plano experimental (2013).

Variável	Faixa de operação
RE	0,2 – 0,4
S/B	0,4 – 1,2
Ts (°C)	700 – 850

Desta forma o planejamento experimental foi montado considerando essas faixas, de modo que as variáveis independentes consideradas foram a vazão de O₂, vazão de vapor d'água e temperatura de *set-point*. A partir de três variáveis e três faixas operacionais é possível construir um plano fatorial, em que os efeitos do problema são analisados em cada um dos pontos do planejamento, por exemplo, com todas as variáveis no ponto inferior das suas respectivas faixas operacionais. Logo este planejamento terá 2³ pontos, ou seja, 8 pontos, mais o ponto central, portanto 9 pontos. Isto permite avaliar os efeitos dentro do domínio proposto (Calado & Montgomey, 2003). Com isto, a vazão de combustível sólido, bagaço de cana, foi considerada constante, para que o plano fatorial não fique muito extenso, e o valor adotado foi 0,8 kg/h, que corresponde a 80% da velocidade de rotação do parafuso, equipamento tipicamente utilizado em plantas piloto para fazer a alimentação de sólido no reator. Com isto, é prevista a operação do equipamento em uma faixa com folga. Esta variável será mais bem avaliada em outro estudo posterior.

A partir dos valores da Tabela 11, é possível então estabelecer os valores das faixas de operação das variáveis independentes para as simulações:

Tabela 12 – Faixa de operação – variáveis independentes

Variável	Faixa de operação
QO2 (kg/h)	0,21 – 0,43
QS (kg/h)	0,32 – 0,96
Ts (°C)	700 – 850

O programa possui uma limitação quanto ao controle de temperatura. Não é possível inserir no programa um valor de *set-point* para a temperatura. Em plantas piloto esse controle é realizado com aquecimento do reator, tanto no leito quanto no *freeboard*, com duas fornalhas no equipamento, uma para cada seção do reator.

Com isso foi preciso contornar esse problema. Primeiramente foi testado simular um caso utilizando aquecimento elétrico, que é possível especificar no programa indicando a potência utilizada. Porém, os resultados não foram satisfatórios, pois o programa não alcançava convergência, já que a suposição de resistência elétrica com potência constante não se mostra correto, uma vez que em planta piloto tipicamente o aquecimento é controlado a fim de manter a temperatura do leito dentro do *set-point*. Os resultados utilizando camisa de aquecimento também foram insatisfatórios, uma vez que as condições do fluido de aquecimento são de difícil especificação. A alternativa encontrada foi a variação das temperaturas dos gases de entrada (O₂ e vapor d'água), sempre mantendo a mesma para ambos. Desta forma, foi possível fornecer o calor necessário ao processo através desta alternativa, mantendo ainda uma variável independente no lugar da temperatura de *set-point*, que foi a temperatura dos gases de entrada (TGE). A Tabela 13 mostra essa troca de variáveis independentes realizada e as novas faixas para essa nova variável:

Tabela 13 – Faixa de operação – novas variáveis independentes.

Variável	Faixa de operação
QO2 (kg/h)	0,21 – 0,43
QS (kg/h)	0,32 – 0,96
TGE (°C)	400 – 680

Tipicamente, a planta possui um sistema de alimentação para cada um desses gases, e ambos possuem suas limitações. Algumas suposições sobre esse sistema são feitas a seguir. A corrente de O₂ é aquecida por um equipamento chamado *preheater*, que aquece o gás antes de entrar no reator. Este equipamento permite ao gás alcançar temperaturas até 400°C. A corrente de vapor também possui um sistema de pré-aquecimento, onde vapor é gerado e pré-aquecido, esse processo é realizado por um evaporador, que também permite ao vapor alcançar temperaturas até 400°C antes de entrar no reator. Como pode ser observada, a faixa superior utilizada no planejamento foi superior ao limite da planta piloto para ambos os casos. Este foi um artifício utilizado para fornecer calor ao sistema, já que não foi possível, no *software*, fazê-lo de outra forma. Contudo em nenhum momento as temperaturas do leito ultrapassam os limites de segurança do reator real, que é de 1000°C, e também a temperatura máxima de operação também não é ultrapassada (900°C). Os resultados do capítulo posterior corroboram essa consideração.

Logo o planejamento experimental realizado foi um plano fatorial com três variáveis em dois níveis (Calado & Montgomey, 2003). As simulações foram desenvolvidas em cada um desses limites para cada uma variável, além de uma simulação no ponto central das três variáveis. Com isso, foram realizadas $2^3 + 1$ simulações, um total de nove pontos. Como na planta piloto há tipicamente flutuações nessas variáveis, no ponto central foram feitas variações condizentes com essas variações experimentais reais, de forma a simular também as incertezas e flutuações operacionais. Logo, por artifício para a simulação, arbitrou-se uma variação em torno do ponto central, com dois níveis para cada variável, conforme a Tabela 14:

Tabela 14 – Flutuações em torno do ponto central.

Variável	Faixa de operação
QO2 (kg/h)	0,288 – 0,352
QS (kg/h)	0,608 – 0,672
TGE (°C)	536 – 544

Portanto foram realizadas 17 simulações no total. Oito para as faixas de operação normal, oito para as faixas de variação do ponto central e o próprio ponto central.

As variações no ponto central foram obtidas levando-se em consideração as incertezas dos equipamentos utilizados na planta piloto. Lenis et al. (2013) avaliaram a repetitividade de facilidades envolvidas em unidades de gaseificação. Neste estudo foi mostrado que a vazão de ar, usando um sistema de controle de vazão (MFC) similar ao instalado na unidade piloto considerada, é reprodutível e apresenta erro experimental de cerca de 10% do valor da vazão.

Será considerado que o sistema de alimentação de vapor d'água da planta piloto possui dois equipamentos principais: uma bomba para abastecimento da água necessária para geração do vapor, e um evaporador, que faz a evaporação dessa água bombeada para formação de vapor, como dito anteriormente até 400°C.

Tipicamente, bombas operam com precisão de até 1% para bombeamento de líquidos. Assim, considerando todo o sistema de suprimento de vapor, para fins de ilustração, será arbitrado o valor de 5% do valor da vazão para o erro experimental desta corrente. Para a medição das temperaturas, são utilizados termopares do tipo K, que apresentam precisão da ordem de ± 4 °C.

Em resumo, as faixas das variações do ponto central foram de $\pm 10\%$ para a vazão de O₂, $\pm 5\%$ para a vazão de vapor d'água e ± 4 °C para as temperaturas dos gases de entrada.

Para realizar as análises, é preciso normalizar as variáveis independentes, de forma que os valores das faixas se encontram no intervalo de -1 a 1. Logo os valores inferiores das faixas serão -1, os valores superiores +1 e o ponto central, juntamente com as suas

variações (incertezas simuladas) serão consideradas como 0. A Tabela 15 demonstra essas considerações, além de converter as unidades das variáveis para as unidades que o programa CeSFaMBTM solicita.

Tabela 15–Valores das variáveis independentes convertidos e normalizados.

	Variável	Valor	Unidade	Valor convertido	Unidade	Valor normalizado
QO2	Limite inferior (LI)	0,21	kg/h	5,83E-5	kg/s	-1
	Limite superior (LS)	0,43	kg/h	1,19E-4	kg/s	1
	Ponto central	0,32	kg/h	8,89E-5	kg/s	0
	LI do ponto central	0,288	kg/h	8,00E-5	kg/s	0
	LS do ponto central	0,352	kg/h	9,78E-5	kg/s	0
QS	Limite inferior (LI)	0,32	kg/h	8,89E-5	kg/s	-1
	Limite superior (LS)	0,96	kg/h	2,67E-4	kg/s	1
	Ponto central	0,64	kg/h	1,78E-4	kg/s	0
	LI do ponto central	0,608	kg/h	1,69E-4	kg/s	0
	LS do ponto central	0,672	kg/h	1,87E-4	kg/s	0
TGE	Limite inferior (LI)	400	°C	673	K	-1
	Limite superior (LS)	680	°C	953	K	1
	Ponto central	540	°C	813	K	0
	LI do ponto central	536	°C	809	K	0
	LS do ponto central	544	°C	817	K	0

Capítulo V. Resultados e Discussões

Neste capítulo, serão dispostos e analisados os resultados obtidos a partir das simulações, de acordo com o planejamento descrito no Capítulo IV. Os resultados obtidos foram provenientes do programa de simulação **CeSFaMB™**. Deste programa, podem-se obter diversas informações acerca do resultado final de cada simulação, porém apenas as que possuem maior interesse no presente estudo serão discutidas daqui em diante. Neste caso, essas informações de interesse são: a composição final dos gases de saída do reator, tanto da forma que é obtido, quanto em base seca, e também tanto em porcentagens mássicas, quanto molares; o perfil de temperatura; perda de carga; vazões volumétricas e mássicas.

O Apêndice I dispõe a tabela com todos os resultados detalhados.

A análise dos resultados foi feita utilizando o programa **StatSoft, Inc. (2011). STATISTICA (data analysis software system), version 10**, ou apenas *Statistica*. Com este programa é possível observar a relevância de cada variável independente, ou seja, cada parâmetro que foi variado de acordo com o planejamento analítico descrito no Capítulo IV, e também interações entre eles, sobre a variável dependente, ou seja, o resultado analisado. A partir dos dados das variáveis independentes e dependentes fornecidos, o programa ajusta um modelo para o sistema, de acordo com a equação (10):

$$y^c = \alpha_0 + \alpha_1 z_1 + \alpha_2 z_2 + \alpha_3 z_3 + \beta_{12} z_1 z_2 + \beta_{13} z_1 z_3 + \beta_{23} z_2 z_3 + \gamma_{123} z_1 z_2 z_3 \quad (10)$$

Em que:

y – variável dependente analisada;

z_i – variável independente;

α_i – parâmetros do modelo;

β_{ij} – parâmetros de interação entre duas variáveis independentes do modelo;

γ_{123} - parâmetro de interação entre as três variáveis independentes do modelo.

O modelo descrito pela equação (10) contempla todos os efeitos principais e todas as interações até a ordem três. O programa, então nos fornece todos esses parâmetros, além dos seus desvios-padrão; do valor p (ou p -level), com o qual é possível avaliar a relevância de cada parâmetro em função do nível de significância admitido, variável independente ou interação; dos limites do intervalo de confiança; da curvatura, caso ela seja relevante ou não; e também do valor R^2 do modelo, indicando se o ajuste foi razoável.

Como cada simulação possui um conjunto de variáveis independentes distinto, cada uma será denominada de uma forma de agora em diante, conforme a Tabela 16.

Tabela 16 – Nomenclatura das Simulações.

Simulação	Vazão gás (kg/s)	Vapor (kg/s)	T gás entrada (K)
A	5,83E-05 (-1)	8,89E-05 (-1)	673 (-1)
B	5,83E-05 (-1)	8,89E-05 (-1)	953 (1)
C	5,83E-05 (-1)	2,67E-04 (1)	673 (-1)
D	5,83E-05 (-1)	2,67E-04 (1)	953 (1)
E	1,19E-04 (1)	8,89E-05 (-1)	673 (-1)
F	1,19E-04 (1)	8,89E-05 (-1)	953 (1)
G	1,19E-04 (1)	2,67E-04 (1)	673 (-1)
H	1,19E-04 (1)	2,67E-04 (1)	953 (1)
I	8,89E-05 (0)	1,78E-04 (0)	813 (0)
J	9,78E-05 (0)	1,69E-04 (0)	809 (0)
K	9,78E-05 (0)	1,69E-04 (0)	817 (0)
L	9,78E-05 (0)	1,87E-04 (0)	809 (0)
M	9,78E-05 (0)	1,87E-04 (0)	817 (0)
N	8,00E-05 (0)	1,69E-04 (0)	809 (0)
O	8,00E-05 (0)	1,69E-04 (0)	817 (0)
P	8,00E-05 (0)	1,87E-04 (0)	809 (0)
Q	8,00E-05 (0)	1,87E-04 (0)	817 (0)

A partir de agora, portanto, serão mostrados os resultados das análises de cada uma das variáveis dependentes (saída).

V.1. Composição dos gases de saída

Os componentes mais interessantes a serem analisados nos gases resultantes do processo de gaseificação são:

- Hidrogênio (H_2)
- Monóxido de Carbono (CO)
- Dióxido de carbono (CO_2)
- Metano (CH_4)
- Água (H_2O)
- Alcatrão

Com a análise destes componentes é possível verificar se o processo de gaseificação foi eficiente, seja qual for a finalidade do processo, tanto na obtenção de gás de síntese quanto na produção de H_2 , entre outras finalidades.

Além disso, a análise é feita tanto para base mássica quanto para base molar. Com os dados em base mássica, é possível observar a quantidade efetiva de cada componente, enquanto que em base molar, é observada a estequiometria do processo. A análise também é feita tanto para base seca quanto total, como o gás é propriamente obtido.

V.1.1. Base Total:

V.1.1.1. Base mássica:

A Figura 16 apresenta um gráfico com a composição mássica dos principais componentes analisados.

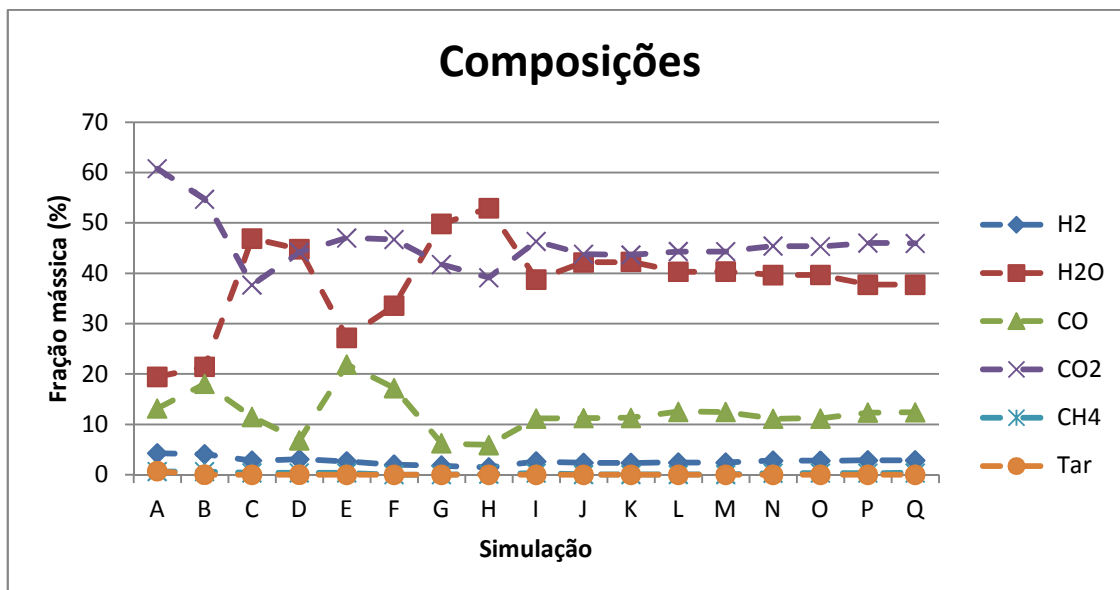


Figura 16 – Composição da corrente de saída em base total e mássica.

Como era de se esperar a água apresentou uma alta fração mássica. Isso ocorre porque o processo é conduzido com uma boa parcela de vapor d'água como reagente, porém a maior parte deste não reage.

Já o CO₂ apresenta uma maior fração devido a sua maior massa molar em relação ao CO. Além disso, a reação de gaseificação não é perfeita, ocorrendo assim combustão completa no interior do reator.

O baixo percentual de H₂ na corrente pode ser explicado pelo fato de o hidrogênio ter uma baixa massa molecular, portanto sua corrente terá uma vazão mássica bem inferior aos demais componentes, por isso a análise em base molar também é importante.

O percentual de metano encontrado foi baixo em todas as simulações, o que pode comprovar que a combustão parcial/total foi eficiente.

V.1.1.2. Base molar:

A Figura 17 apresenta um gráfico com a composição molar dos principais componentes analisados.

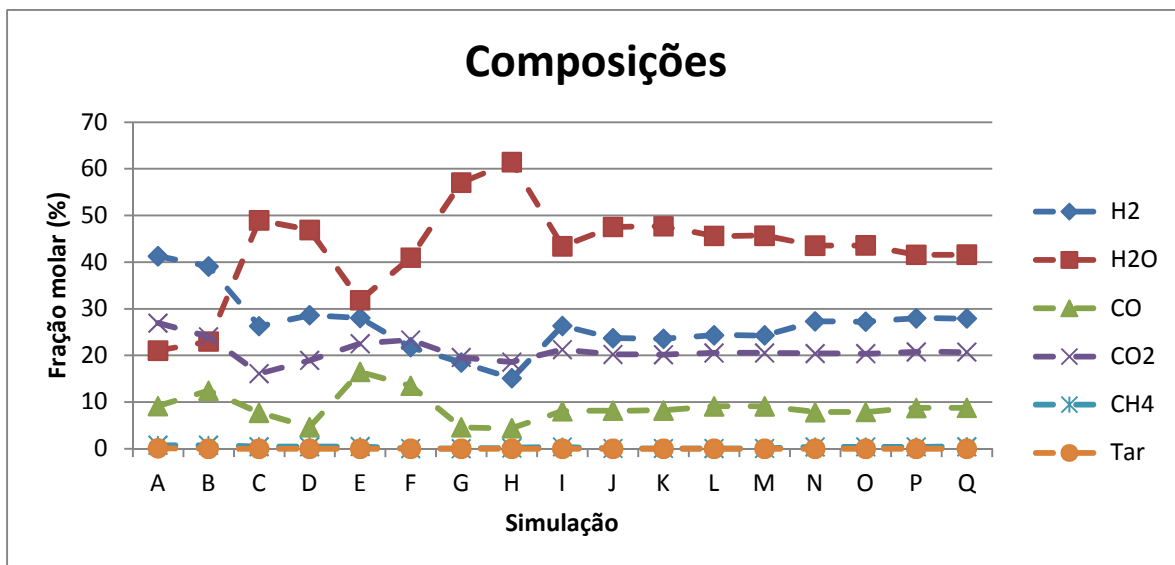


Figura 17 - Composição da corrente de saída em base total e molar.

Como descrito para o caso mássico, a água apresenta alto percentual devido à alimentação do sistema com vapor d'água e sua baixa participação efetiva nas reações.

Neste caso as concentrações de CO e CO₂ estão mais próximas, como dito anteriormente, a diferença entre as frações mássicas e molares se deve à diferença nos pesos moleculares. Contudo, a partir deste gráfico é possível notar que a formação de monóxido de carbono foi baixa, isto se deve pela maior formação de hidrogênio.

Novamente, podemos observar as baixas frações de metano e alcatrão. Isto pode ser considerado um fator positivo para o processo de gaseificação, principalmente em relação ao alcatrão.

Como a formação de hidrogênio é alta, há um maior consumo do CO. Isto ocorre pela presença de vapor d'água na reação, além do oxigênio. Este gráfico (**Figura 17**) é muito importante para a avaliação da quantidade de hidrogênio formado no processo de gaseificação, já que está expresso em base molar.

Para melhor compreensão do resultado é feito, portanto, uma análise mais aprofundada dos principais componentes, no caso – H₂; CO; CO₂ e H₂O, utilizando o *software Statistica*, para este caso molar. As análises do CH₄ e alcatrão não se fazem necessárias uma vez que suas composições são sempre baixas:

V.1.1.2.1. Análise do H₂

Fazendo a análise considerando todas as interações, conforme o modelo linear descrito anteriormente:

Tabela 17 – Análise de H₂ – todos os parâmetros.

	Valor do parâmetro	Desvio padrão	Valor p	-95,%	+95,%
Mean/Interc. (α_0)	26,5540	0,490368	0,000000	25,4447	27,66330
(1)Vazão O ₂ (α_1)	-12,9633	1,429657	0,000008	-16,1974	-9,72919
(2)Vazão Vapor (α_2)	-10,4122	1,429657	0,000046	-13,6463	-7,17809
(3)Temperatura (α_3)	-2,3743	1,429657	0,131133	-5,6084	0,85981
1 by 2 (β_{12})	2,3189	1,429657	0,139261	-0,9153	5,55296
1 by 3 (β_{13})	-2,4512	1,429657	0,120580	-5,6853	0,78296
2 by 3 (β_{23})	1,8574	1,429657	0,226183	-1,3768	5,09146
1*2*3 (γ_{123})	-0,4154	1,429657	0,777973	-3,6495	2,81871

Como podem ser observadas, todas as variáveis independentes possuem um efeito principal negativo na variável dependente; contudo apenas as variáveis 1 e 2, Vazão de O₂ e Vazão de Vapor, são relevantes (valor p menor que 0,05; linha destacada em vermelho). O valor de *p-level* inferior a 0,05 garante com um nível de confiança de pelo menos 95 % que um determinado fator influencia a variável dependente analisada.

Considerando uma curvatura para esse modelo:

Tabela 18 – Análise de H₂– Curvatura.

	Valor do parâmetro	Desvio padrão	Valor p	-95,%	+95,%
Mean/Interc. (α_0)	27,3347	0,656472	0,000000	25,8208	28,84850
Curvatr.	-2,9492	1,804469	0,140819	-7,1103	1,21192
(1)Vazão O ₂ (α_1)	-12,9633	1,312944	0,000009	-15,9910	-9,93565
(2)Vazão Vapor (α_2)	-10,4122	1,312944	0,000046	-13,4399	-7,38455
(3)Temperatura (α_3)	-2,3743	1,312944	0,108159	-5,4020	0,65335
1 by 2 (β_{12})	2,3189	1,312944	0,115362	-0,7088	5,34650
1 by 3 (β_{13})	-2,4512	1,312944	0,098875	-5,4788	0,57650
2 by 3 (β_{23})	1,8574	1,312944	0,194893	-1,1703	4,88500
1*2*3 (γ_{123})	-0,4154	1,312944	0,759806	-3,4431	2,61225

Como se pode perceber, nenhuma interação possui relevância, nem a variável 3 (T) e nem a curvatura, ou seja, um modelo linear considerando a vazão de gás e vapor pode representar bem a resposta à variável fração de H₂ molar:

Tabela 19 – Análise de H₂ – parâmetros relevantes.

	Valor do parâmetro	Desvio padrão	Valor p	-95,%	+95,%
Mean/Interc. (α_0)	26,5540	0,572772	0,000000	25,3255	27,78248
(1)Vazão O ₂ (α_1)	-12,9633	1,669903	0,000002	-16,5449	-9,38171
(2)Vazão Vapor (α_2)	-10,4122	1,669903	0,000022	-13,9938	-6,83061

Além destas observações, o modelo para o caso considerando apenas os parâmetros relevantes apresentou um valor de $R^2 = 0,87626$, indicando que o modelo representa razoavelmente o resultado em relação ao H₂.

V.1.1.2.2. Análise do CO:

Fazendo a análise considerando todas as interações, conforme o modelo linear descrito anteriormente:

Tabela 20 – Análise de CO – todos os parâmetros.

	Valor do parâmetro	Desvio padrão	Valor p	-95,%	+95,%
Mean/Interc. (α_0)	8,75635	0,162235	0,000000	8,38935	9,12335
(1)Vazão O ₂ (α_1)	1,26358	0,472992	0,025562	0,19359	2,33356
(2)Vazão Vapor (α_2)	-7,56033	0,472992	0,000000	-8,63031	-6,49034
(3)Temperatura (α_3)	-0,75018	0,472992	0,147196	-1,82016	0,31981
1 by 2 (β_{12})	-2,92668	0,472992	0,000161	-3,99666	-1,85669
1 by 3 (β_{13})	-0,83663	0,472992	0,110717	-1,90661	0,23336
2 by 3 (β_{23})	-0,90642	0,472992	0,087565	-1,97641	0,16356
1*2*3 (γ_{123})	2,28873	0,472992	0,000923	1,21874	3,35871

Como podem ser observados, todos os termos do modelo possuem um efeito negativo na variável dependente, com exceção da variável (1) – Vazão de O₂ e do efeito de interação entre todas as variáveis. Além disso, pode-se observar que assim como as variáveis (1) e (2) apresentam relevância ao modelo, as interações (1)-(2) e (1)-(2)-(3) também apresentam. Logo, o modelo linear não parece ser adequado, é preciso analisar se a curvatura é relevante.

Considerando, portanto, uma curvatura para esse modelo:

Tabela 21 – Análise de CO – Curvatura.

	Valor do parâmetro	Desvio padrão	Valor p	-95,%	+95,%
Mean/Interc. (α_0)	9,12026	0,177911	0,000000	8,71000	9,53053
Curvatr.	-1,37479	0,489032	0,022799	-2,50250	-0,24708
(1)Vazão O2 (α_1)	1,26358	0,355823	0,007497	0,44305	2,08410
(2)Vazão Vapor (α_2)	-7,56033	0,355823	0,000000	-8,38085	-6,73980
(3)Temperatura (α_3)	-0,75018	0,355823	0,068055	-1,57070	0,07035
1 by 2 (β_{12})	-2,92668	0,355823	0,000036	-3,74720	-2,10615
1 by 3 (β_{13})	-0,83663	0,355823	0,046591	-1,65715	-0,01610
2 by 3 (β_{23})	-0,90642	0,355823	0,034313	-1,72695	-0,08590
1*2*3 (γ_{123})	2,28873	0,355823	0,000202	1,46820	3,10925

Como se pode perceber, a curvatura é relevante, logo o modelo linear não é adequado para esta variável. Seria necessário outro tipo de análise, como por exemplo, uma análise de superfície de resposta.

Contudo pode-se concluir que a vazão de O₂ apresenta uma relação direta com concentração de CO nos gases produzidos, ao contrário da vazão de vapor que apresenta relação reversa, sendo esta, a variável de entrada mais importante em relação à concentração de CO nos gases produzidos. A temperatura isoladamente não é um fator relevante. No entanto, as interações observadas entre a temperatura e as outras variáveis de entrada (vazão de vapor e de O₂) se apresentam significativas, sendo a principal interação, aquela observada entre as três variáveis de entrada. Diante disto, a variação de CO em relação a cada variável de entrada pode ser descrita, de acordo com as equações (11), (12) e (13), considerando o modelo linear.

$$\frac{\partial y_{CO}}{\partial z_1} = 1,3 - 2,9z_2 - 0,8z_3 + 2,3z_2z_3 \quad (11)$$

$$\frac{\partial y_{CO}}{\partial z_2} = -7,6 - 2,9z_1 - 0,9z_3 + 2,3z_1z_3 \quad (12)$$

$$\frac{\partial y_{CO}}{\partial z_3} = -0,8z_1 - 0,9z_2 + 2,3z_1z_2 \quad (13)$$

A análise das Equações (11), (12) e (13) mostra que a sensibilidade da concentração de CO em relação a cada variável dependente não é constante e apresenta mudança de sinal ao longo da faixa experimental avaliada, uma vez que os lados direitos das equações (11), (12) e (13) apresentam dependências relativas a z_1 , z_2 , z_3 e/ou combinação destas variáveis. Ao analisar especificamente a Equação (11), que revela a dependência da sensibilidade da referida variável de saída em relação à vazão de oxigênio, observa-se que nos limites superiores de vazão de vapor e temperatura (+1 e +1), o aumento de vazão de oxigênio não provoca variações apreciáveis do teor de CO na corrente de saída, pois os efeitos esperados ocorrem em sentidos diferentes tendo como consequência um valor resultante de sensibilidade próximo a zero ($\frac{\partial y_{CO}}{\partial z_1} = -0,1$ em $z_2 = z_3 = +1$). Porém, nos limites inferiores de vazão de vapor e temperatura, a sensibilidade do teor de CO em relação à vazão de oxigênio é máxima ($\frac{\partial y_{CO}}{\partial z_1} = 6,8$ em $z_2 = z_3 = -1$). Nos limites inferior de vazão de vapor e superior de temperatura, a sensibilidade do teor de CO em relação à vazão de oxigênio é igual a 1,1, enquanto que nos limites superior de vazão de vapor e inferior de temperatura, a referida sensibilidade é igual a -3,1. Efetuando-se a mesma análise com base nas equações (12) e (13) observa-se que no vértice, no qual é obtido o maior teor de CO na corrente de gases produzidos (vértice +1,-1,-1), esta variável apresenta relação direta em relação às vazões de oxigênio (7,3) e vapor (4,0) e reversa em relação à temperatura (-1,5), sendo a vazão de oxigênio a variável mais importante. Uma análise sobre condições ótimas de operação no intervalo proposto não é possível, uma vez que o planejamento desenvolvido não permite o adequado reconhecimento do termo quadrático.

V.1.1.2.3. Análise do CO₂:

Fazendo a análise considerando todas as interações, conforme o modelo linear descrito anteriormente:

Tabela 22 – Análise de CO₂ – todos os parâmetros.

	Valor do parâmetro	Desvio padrão	Valor p	-95,%	+95,%
Mean/Interc. (α_0)	20,88341	0,138145	0,000000	20,57091	21,19592
(1)Vazão O2 (α_1)	-0,48940	0,402760	0,255236	-1,40051	0,42171
(2)Vazão Vapor (α_2)	-5,89800	0,402760	0,000000	-6,80911	-4,98689
(3)Temperatura (α_3)	-0,06860	0,402760	0,868522	-0,97971	0,84251
1 by 2 (β_{12})	2,04320	0,402760	0,000669	1,13209	2,95431
1 by 3 (β_{13})	-0,02380	0,402760	0,954170	-0,93491	0,88731
2 by 3 (β_{23})	0,99670	0,402760	0,035298	0,08559	1,90781
1*2*3 (γ_{123})	-1,89380	0,402760	0,001117	-2,80491	-0,98269

Como podem ser observados, todos os termos do modelo possuem um efeito negativo na variável dependente, com exceção do efeito das interações (1)-(2) e (2)-(3). Além disso, pode-se observar que, assim como a variável (2) apresenta relevância ao modelo, as interações (1)-(2), (2)-(3) e (1)-(2)-(3) também apresentam. Logo, o modelo linear não parece ser adequado, é preciso analisar se a curvatura é relevante.

Considerando, portanto, uma curvatura para esse modelo:

Tabela 23 – Análise de CO₂ – Curvatura.

	Valor do parâmetro	Desvio padrão	Valor p	-95,%	+95,%
Mean/Interc. (α_0)	21,25255	0,115973	0,000000	20,98512	21,51998
Curvatr.	-1,39452	0,318780	0,002366	-2,12963	-0,65941
(1)Vazão O2 (α_1)	-0,48940	0,231947	0,067877	-1,02427	0,04547
(2)Vazão Vapor (α_2)	-5,89800	0,231947	0,000000	-6,43287	-5,36313
(3)Temperatura (α_3)	-0,06860	0,231947	0,774947	-0,60347	0,46627
1 by 2 (β_{12})	2,04320	0,231947	0,000022	1,50833	2,57807
1 by 3 (β_{13})	-0,02380	0,231947	0,920798	-0,55867	0,51107
2 by 3 (β_{23})	0,99670	0,231947	0,002626	0,46183	1,53157
1*2*3 (γ_{123})	-1,89380	0,231947	0,000038	-2,42867	-1,35893

Como se pode perceber, a curvatura é relevante, logo o modelo linear não é adequado para esta variável. O reconhecimento dos fatores que provocam a curvatura, no entanto, não poderia ser alcançado com este plano experimental; no entanto, é possível avaliar os efeitos provocados pelos fatores aqui considerados, visto que o R² do modelo é 0,99049.

Contudo, pode-se concluir que a vazão de vapor apresenta um efeito negativo e predominante na concentração de CO₂ nos gases produzidos e se mostra relevante a esta variável. Logo, para se diminuir a concentração de CO₂ nos gases produzidos seria necessário aumentar a vazão de vapor na entrada.

V.1.1.2.4. Análise de H₂O:

Fazendo a análise considerando todas as interações, conforme o modelo linear descrito anteriormente:

Tabela 24 – Análise de H₂O – todos os parâmetros.

	Valor do parâmetro	Desvio padrão	Valor p	-95,%	+95,%
Mean/Interc. (α_0)	43,02731	0,732430	58,74600	0,000000	41,37044
(1)Vazão O2 (α_1)	12,84403	2,135381	6,01486	0,000199	8,01346
(2)Vazão Vapor (α_2)	24,37888	2,135381	11,41664	0,000001	19,54831
(3)Temperatura (α_3)	3,34828	2,135381	1,56800	0,151326	-1,48229
1 by 2 (β_{12})	-1,54773	2,135381	-0,72480	0,486989	-6,37829
1 by 3 (β_{13})	3,41668	2,135381	1,60003	0,144056	-1,41389
2 by 3 (β_{23})	-2,18868	2,135381	-1,02496	0,332142	-7,01924
1*2*3 (γ_{123})	-0,18458	2,135381	-0,08644	0,933012	-5,01514

Como podem ser observados, todos os termos do modelo apresentam relação direta com a variável dependente, com exceção dos efeitos das interações (1)-(2), (2)-(3) e (1)-(2)-(3). Além disso, pode-se observar que apenas as variáveis (1) e (2) apresentam relevância ao modelo.

Considerando uma curvatura para esse modelo:

Tabela 25 – Análise de H₂O – Curvatura.

	Valor do parâmetro	Desvio padrão	Valor p	-95,%	+95,%
Mean/Interc. (α_0)	41,39976	0,810567	51,07504	0,000000	39,53059
Curvatr.	6,14852	2,228037	2,75961	0,024690	1,01066
(1)Vazão O2 (α_1)	12,84403	1,621135	7,92286	0,000047	9,10568
(2)Vazão Vapor (α_2)	24,37888	1,621135	15,03815	0,000000	20,64053
(3)Temperatura (α_3)	3,34828	1,621135	2,06539	0,072748	-0,39007
1 by 2 (β_{12})	-1,54773	1,621135	-0,95472	0,367675	-5,28607
1 by 3 (β_{13})	3,41668	1,621135	2,10758	0,068129	-0,32167
2 by 3 (β_{23})	-2,18868	1,621135	-1,35009	0,213940	-5,92702
1*2*3 (γ_{123})	-0,18458	1,621135	-0,11386	0,912158	-3,92292

Como se pode perceber, a curvatura é relevante; logo o modelo linear não é adequado para esta variável. Seria necessário outro tipo de análise, como dito anteriormente, uma análise de superfície de resposta.

Contudo, pode-se concluir que as vazões de O₂ e de vapor apresentam efeito direto na concentração de H₂O nos gases produzidos e se mostram relevantes a esta variável, principalmente a vazão de vapor, o que era de se esperar.

V.1.2. Base Seca:

V.1.2.1. Base mássica:

A Figura 18 apresenta um gráfico com a composição mássica na base seca dos principais componentes analisados.

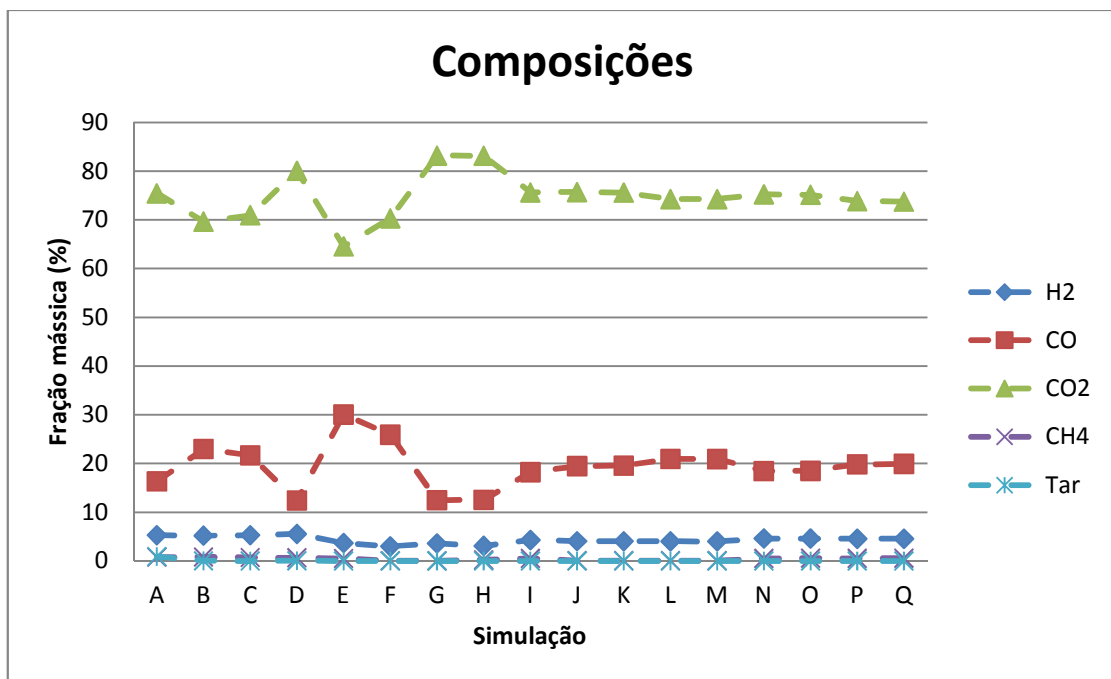


Figura 18 - Composição da corrente de saída em base seca e mássica.

A análise da composição em base seca é similar à feita anteriormente em base total, com a exceção apenas que não há água.

V.1.2.2. Base molar:

A Figura 19 apresenta um gráfico com a composição molar dos principais componentes analisados, em base seca.

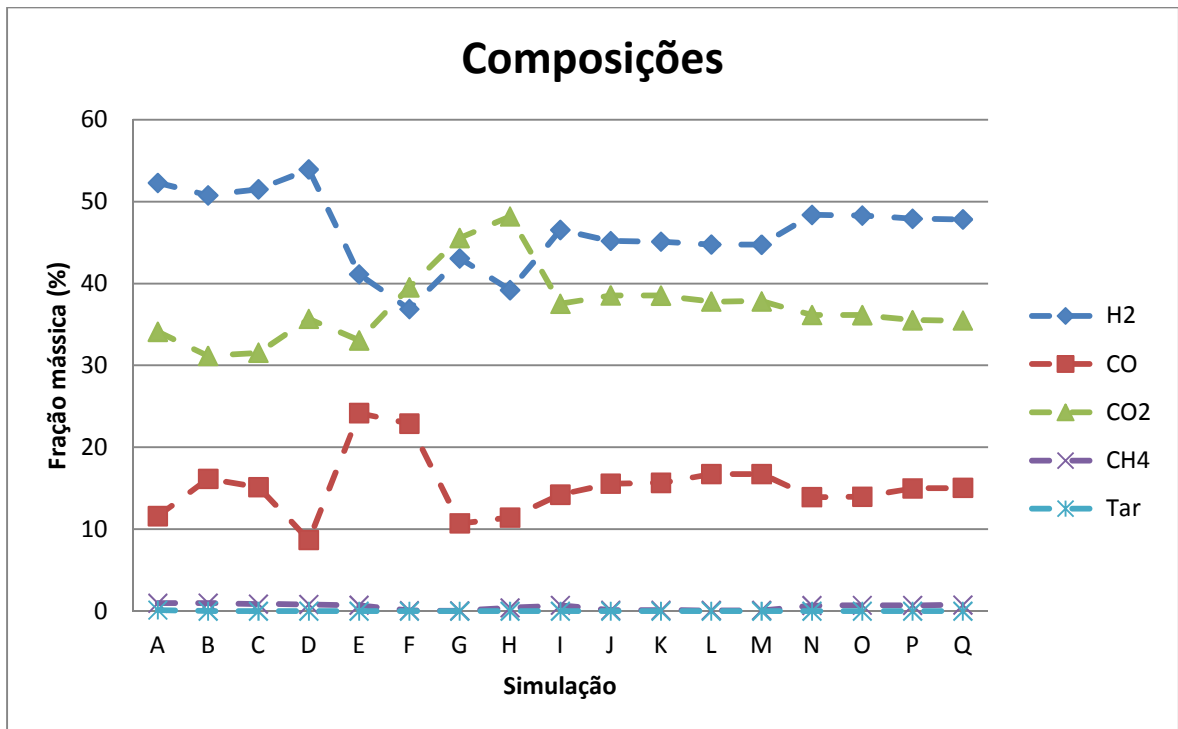


Figura 19 - Composição da corrente de saída em base seca e molar.

Novamente, a análise para a base seca molar é similar à feita na base total, porém o gráfico acima permite observar a proporção entre os principais produtos sem a interferência da água, que estaria em excesso no sistema.

Portanto os gráficos em base seca facilitam a compreensão dos efeitos apresentados com o *Statistica*; portanto, uma nova análise com o programa não se faz necessária, já que os resultados seriam similares.

V.2. Temperatura

A Figura 20 apresenta o comportamento das temperaturas médias no leito (TML) do gaseificador durante o processo, para cada simulação.

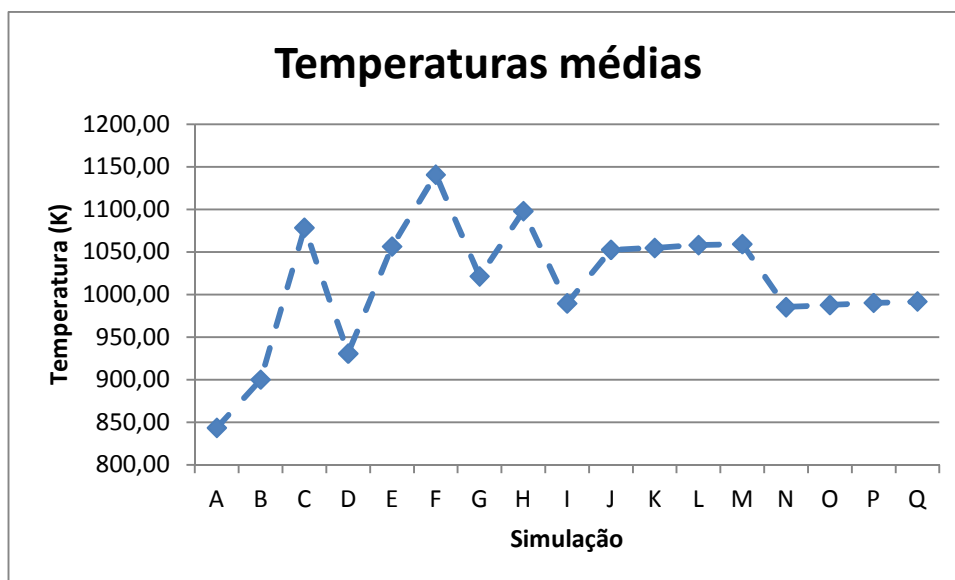


Figura 20 – Gráfico das temperaturas médias no leito em cada simulação.

Fazendo a análise no *Statistica* considerando todas as interações, conforme o modelo linear descrito anteriormente, e considerando a variável dependente como sendo a média das temperaturas no leito:

Tabela 26 – Análise da TML – todos os parâmetros.

	Valor do parâmetro	Desvio padrão	Valor p	-95,%	+95,%
Mean/Interc. (α_0)	1013,940	8,29633	122,2155	995,173	1032,708
(1)Vazão O2 (α_1)	140,953	24,18775	5,8275	86,237	195,670
(2)Vazão Vapor (α_2)	46,952	24,18775	1,9411	-7,765	101,668
(3)Temperatura (α_3)	17,425	24,18775	0,7204	-37,291	72,141
1 by 2 (β_{12})	-85,857	24,18775	-3,5496	-140,573	-31,140
1 by 3 (β_{13})	63,040	24,18775	2,6063	8,324	117,756
2 by 3 (β_{23})	-53,008	24,18775	-2,1915	-107,725	1,708
1*2*3 (γ_{123})	49,157	24,18775	2,0323	-5,560	103,873

Das variáveis independentes, apenas a vazão de O₂ é relevante, enquanto das interações podem-se destacar (1)-(2) e (1)-(3).

Como há interações, é preciso analisar se a curvatura para o modelo é significativa.

Tabela 27 – Análise da TML – Curvatura.

	Valor do parâmetro	Desvio padrão	Valor p	-95,%	+95,%
Mean/Interc. (α_0)	1008,573	12,55953	80,30339	979,610	1037,535
Curvatr.	20,278	34,52283	0,58738	-59,332	99,888
(1)Vazão O2 (α_1)	140,953	25,11905	5,61141	83,029	198,878
(2)Vazão Vapor (α_2)	46,952	25,11905	1,86917	-10,973	104,876
(3)Temperatura (α_3)	17,425	25,11905	0,69370	-40,500	75,350
1 by 2 (β_{12})	-85,857	25,11905	-3,41799	-143,781	-27,932
1 by 3 (β_{13})	63,040	25,11905	2,50965	5,115	120,965
2 by 3 (β_{23})	-53,008	25,11905	-2,11028	-110,933	4,916
1*2*3 (γ_{123})	49,157	25,11905	1,95695	-8,768	107,081

Como pode ser observada, a curvatura para esse modelo não é relevante, logo o modelo linear parece ser bastante razoável.

Pode-se também analisar o erro que o modelo, sem considerar a curvatura, fornece. Utilizando os valores dos parâmetros do modelo da Tabela 26 na equação 10, pode ser obtido o valor da temperatura média do leite que o modelo fornece para um determinado conjunto de variáveis dependentes. A diferença deste valor com o valor experimental, alcançado nas simulações, dividido pelo valor experimental, é esse erro que o modelo proporciona. A equação 11 explicita melhor esse cálculo.

$$\varepsilon = \frac{TML_{modelo} - TML_{exp}}{TML_{exp}} * 100 \quad (11)$$

Logo a Figura 21 demonstra os erros para cada simulação realizada.

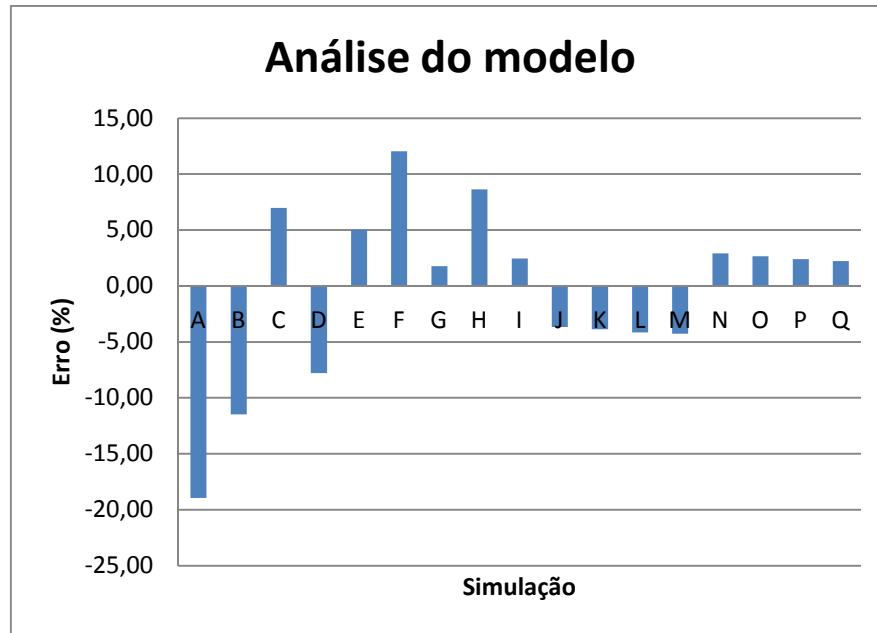


Figura 21– Erro entre modelo x simulação - TML.

O modelo apresenta um erro relativamente baixo, apenas nas simulações A e B há um erro um pouco maior. O modelo previsto pelo software, sem considerar curvatura, possui um valor de R^2 de 0.88091, indicando uma boa aproximação e podendo assim ser considerado relevante.

V.3. Perda de carga

Foram analisadas duas perdas de cargas, as quais são responsáveis pela perda de carga total do sistema. São as perdas de carga na placa distribuidora e a perda de carga ao longo do leito.

A Figura 22 apresenta um gráfico explicitando essas perdas:

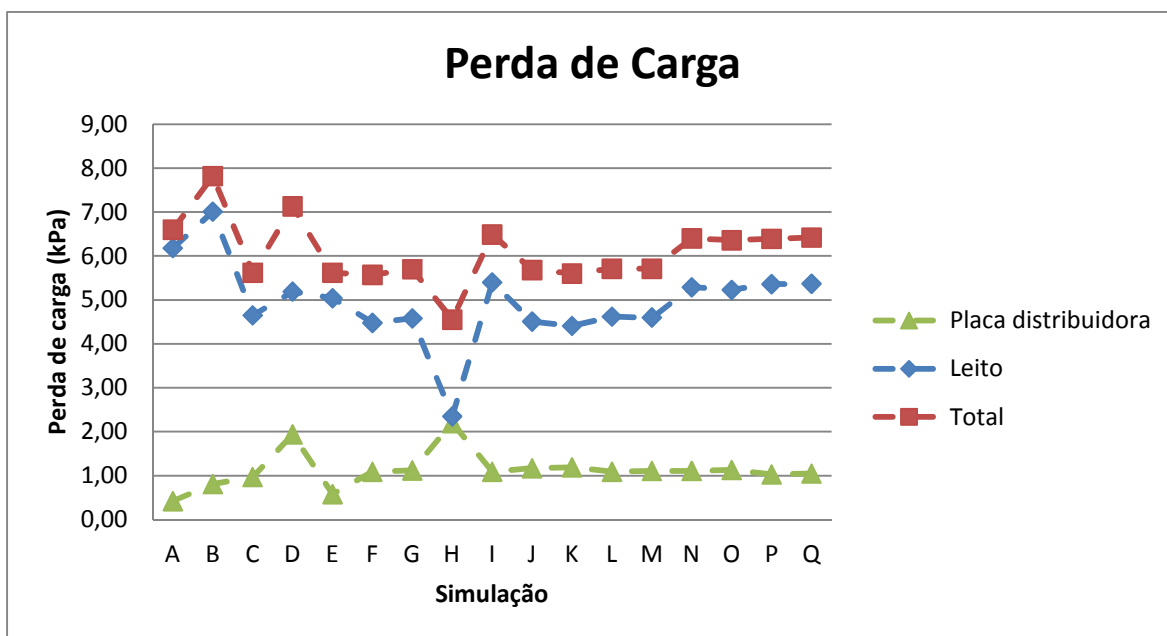


Figura 22– Perda de carga do processo de gaseificação.

Pode ser observado que a perda de carga total segue o perfil da perda de carga no leito, já que a perda de carga na placa distribuidora é bem menor. Logo para efeitos de análises, será considerada apenas a perda de carga total do sistema (PCT).

Fazendo a análise no *Statistica* considerando todas as interações, conforme o modelo linear descrito anteriormente e considerando a variável dependente como sendo a perda de carga total:

Tabela 28 – Análise da PCT – todos os parâmetros.

	Valor do parâmetro	Desvio padrão	Valor p	-95,%	+95,%
Mean/Interc. (α_0)	6,08059	0,089476	67,95788	5,87818	6,282997
(1)Vazão O ₂ (α_1)	-1,43250	0,260865	-5,49135	-2,02262	-0,842383
(2)Vazão Vapor (α_2)	-0,65250	0,260865	-2,50130	-1,24262	-0,062383
(3)Temperatura (α_3)	0,38250	0,260865	1,46628	-0,20762	0,972617
1 by 2 (β_{12})	0,18250	0,260865	0,69960	-0,40762	0,772617
1 by 3 (β_{13})	-0,98250	0,260865	-3,76632	-1,57262	-0,392383
2 by 3 (β_{23})	-0,20250	0,260865	-0,77626	-0,79262	0,387617
1*2*3 (γ_{123})	-0,34750	0,260865	-1,33211	-0,93762	0,242617

Das variáveis independentes, a vazão de O₂ e de vapor são relevantes, enquanto das interações podem-se destacar (1)-(3).

Como há interações, é preciso analisar se a curvatura para o modelo é significativa.

Tabela 29 – Análise da PCT – Curvatura.

	Valor do parâmetro	Desvio padrão	Valor p	-95,%	+95,%
Mean/Interc. (α_0)	6,07625	0,138328	43,92629	5,75726	6,395236
Curvatr.	0,01639	0,380228	0,04310	-0,86042	0,893197
(1)Vazão O2 (α_1)	-1,43250	0,276657	-5,17790	-2,07047	-0,794529
(2)Vazão Vapor (α_2)	-0,65250	0,276657	-2,35852	-1,29047	-0,014529
(3)Temperatura (α_3)	0,38250	0,276657	1,38258	-0,25547	1,020471
1 by 2 (β_{12})	0,18250	0,276657	0,65966	-0,45547	0,820471
1 by 3 (β_{13})	-0,98250	0,276657	-3,55133	-1,62047	-0,344529
2 by 3 (β_{23})	-0,20250	0,276657	-0,73195	-0,84047	0,435471
1*2*3 (γ_{123})	-0,34750	0,276657	-1,25607	-0,98547	0,290471

Como pode ser observada, a curvatura para esse modelo não é relevante, logo o modelo linear parece ser bastante razoável.

Assim como que para as temperaturas médias do leito, pode-se também analisar o erro que o modelo, sem considerar a curvatura, fornece para as perdas de carga, conforme a Figura 23 mostra.

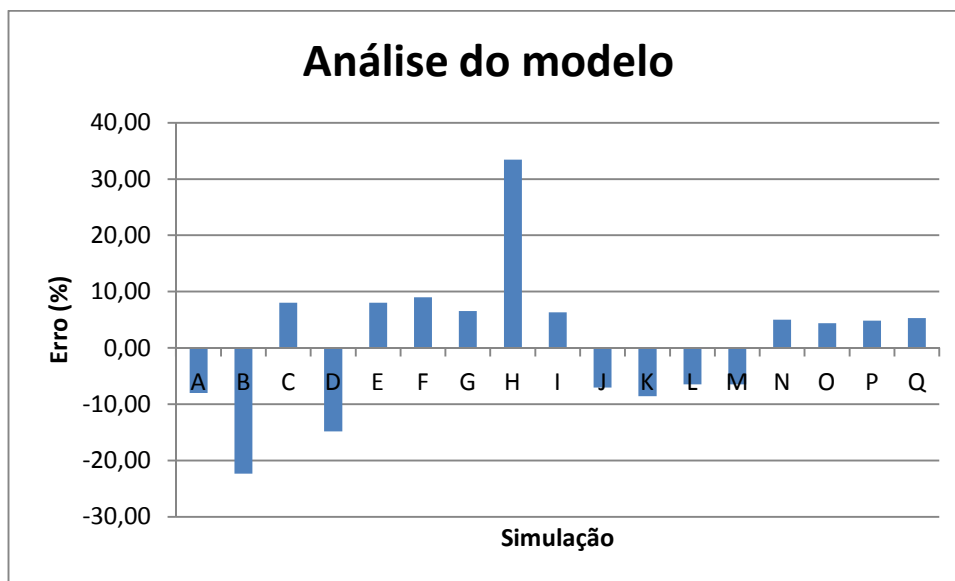


Figura 23– Erro entre modelo x simulação - PCT.

O modelo apresenta um erro relativamente baixo, apenas na simulação H há um erro fora do normal. O modelo previsto pelo software, sem considerar curvatura, possui um valor de R^2 de 0.86071, indicando uma boa aproximação e podendo assim ser considerado relevante.

V.4. Vazões do gás de saída

V.4.1. Volumétrica

Em relação à vazão do gás produzido, podemos expressá-la de duas formas, mássica ou volumétrica. Neste momento será analisada a vazão volumétrica.

O gráfico da Figura 24 mostra o comportamento da vazão volumétrica em cada simulação:

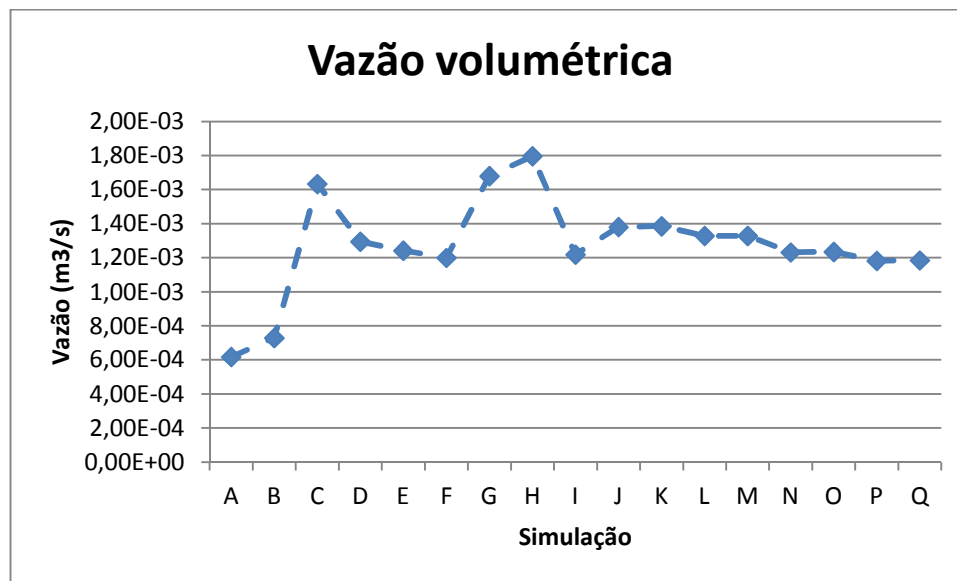


Figura 24 – Vazão volumétrica em cada simulação.

O comportamento já era esperado. As duas primeiras simulações (A e B) possuem as menores vazões de O₂ e vapor, logo o gás produzido também teve uma vazão menor. Conforme essas vazões são aumentadas verifica-se um aumento na vazão do gás produzido.

V.4.2. Mássica

A vazão mássica (W) pode expressar melhor a quantidade total de gás produzido.

O gráfico da Figura 25 mostra o comportamento da vazão mássica em cada simulação:

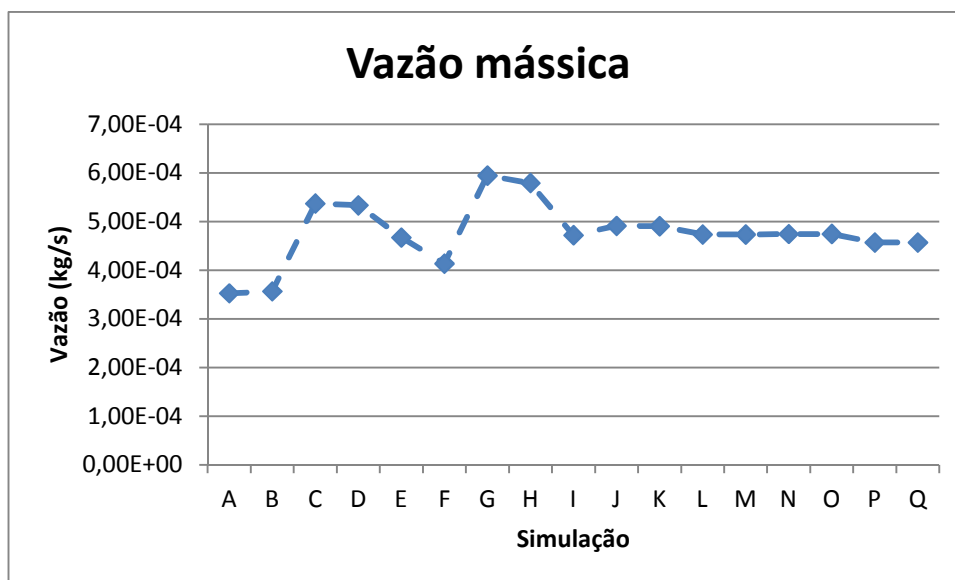


Figura 25 – Vazão mássica em cada simulação.

Como se pode perceber, a variação é muito similar à da vazão volumétrica.

Fazendo a análise no *Statistica* considerando todas as interações, conforme o modelo linear descrito anteriormente, e considerando a variável dependente como sendo a vazão mássica:

Tabela 30 – Análise de W – todos os parâmetros.

	Valor do parâmetro	Desvio padrão	Valor p	-95,%	+95,%
Mean/Interc. (α_0)	4,76E-04	2,89E-06	165,0398	4,70E-04	4,83E-04
(1)Vazão O2 (α_1)	6,86E-05	8,41E-06	8,1526	4,95E-05	8,76E-05
(2)Vazão Vapor (α_2)	1,64E-04	8,41E-06	19,4430	1,45E-04	1,83E-04
(3)Temperatura (α_3)	-1,71E-05	8,41E-06	-2,0369	-3,62E-05	1,89E-06
1 by 2 (β_{12})	-1,71E-05	8,41E-06	-2,0304	-3,61E-05	1,95E-06
1 by 3 (β_{13})	-1,73E-05	8,41E-06	-2,0607	-3,64E-05	1,69E-06
2 by 3 (β_{23})	7,70E-06	8,41E-06	0,9150	-1,13E-05	2,67E-05
1*2*3 (γ_{123})	1,15E-05	8,41E-06	1,3729	-7,48E-06	3,06E-05

É possível notar que as interações e a temperatura não possuem relevância no modelo. Logo este modelo linear já apresenta uma boa estimativa para a vazão final do gás de saída. O coeficiente R^2 é igual a 0,9808; portanto o modelo está bem ajustado.

Capítulo VI. Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros

Neste momento, serão apresentadas as conclusões que se podem chegar a partir dos resultados e das discussões dispostas no capítulo anterior. Todas as conclusões apresentadas estão definidas dentro da faixa operacional de cada variável independente analisada no estudo e também foram avaliadas baseando-se nos modelos obtidos pelo programa *Statistica* se utilizando dos resultados do CeSFaMBTM. A utilização dessas variáveis fora da sua respectiva faixa operacional mencionada, não pode ser baseada nas conclusões deste trabalho.

A composição do gás de saída do processo varia bastante com os fatores que foram propostos a serem analisados. Por isso a importância desse trabalho, já que o processo de gaseificação pode possuir diversos objetivos, seja a obtenção de apenas H₂, ou gás de síntese (H₂ + CO), entre outras.

Se o objetivo do processo de gaseificação for a obtenção de H₂, então a vazão de O₂ e de vapor d'água devem ser minimizadas dentro da faixa operacional proposta, de forma a reação de gaseificação proporcionar através da combustão incompleta maior rendimento do produto desejável. Além disso, a partir do modelo proposto, pode-se obter uma boa previsão do resultado, variando esses dois fatores.

Contudo se o objetivo do processo for a obtenção de gás de síntese, o qual a relação CO/H₂ é variável e depende da sua aplicação, deve-se ponderar o aumento da vazão de O₂ com a diminuição do vapor d'água dentro de suas respectivas faixas operacionais que foram propostas, de forma a obter a estequiometria adequada para o produto desejado. A partir dos modelos propostos, é possível obter valores razoáveis da quantidade de H₂ produzido variando esses fatores, porém para o CO apenas uma análise qualitativa é possível. Logo, outros tipos de análises poderiam ser utilizados para previsão desses resultados, como por exemplo, uma análise de superfície de resposta ou a utilização de um modelo a base de redes neurais. Deve-se atentar também para o fato de que não é possível realizar a otimização do processo apenas com esse modelo linear, já que os efeitos foram avaliados individualmente.

De uma maneira geral, a maioria dos efeitos produzidos pelo processo, que foram analisados no presente trabalho, foi bem representada pelo modelo linear previsto a partir da análise de efeitos proposta. Contudo, modelos de algumas variáveis, como o CO, não obtiveram um resultado satisfatório, no que se refere ao modelo linear, uma vez que a análise mostrou que há curvaturas e este modelo linear não seria razoável. Apesar disso, todas as análises realizadas puderam ter uma resposta no mínimo qualitativa, já que foi possível perceber a relevância de cada um dos fatores analisados que influenciavam o processo, assim como as interações entre eles.

Logo com o presente trabalho é possível obter um bom conhecimento do comportamento do processo de gaseificação utilizando o bagaço de cana. Contudo para ter uma análise mais aprofundada e precisa, seria necessário utilizar modelos não lineares para as respostas do processo, o que pode se tornar um estudo futuro.

Bibliografia

- Anthony, E. J. (1995). Fluidized bed combustion of alternative solid fuels; status, successes and problems of the technology. *Prog. Energy Combust. Sci.* , pp. 239-268.
- Basu, P. (2010). *Biomass gasification and pyrolysis - Practical design and theory*. Elsevier.
- Basu, P. (2006). *Combustion and Gasification in Fluidized Beds*. Taylor & Francis Group, LLC.
- Brito, P. S., & Calado, L. F. (2012). Gaseificação Térmica de Resíduos Agroindustriais. *III Seminário de I&DT . C3i – Centro Interdisciplinar de Investigação e Inovação do Instituto Politécnico de Portalegre*.
- Calado, V., & Montgomey, D. (2003). *Planejamento de experimentos usando Statistica*. E-Papers.
- Campoy, M., Gómez-Barea, A., Vidal, F. B., & Ollero, P. (2009). Air–steam gasification of biomass in a fluidised bed: Process optimisation by enriched air. *Fuel Processing Technology 90* , pp. 677-685.
- Campoy, M., Gómez-Barea, A., Villanueva, A. L., & Ollero, P. (2008). Air-Steam Gasification of Biomass in a Fluidized Bed under Simulated Autothermal and Adiabatic Conditions. *Ind. Eng. Chem. Res.* , pp. 5957-5965.
- Castellanos, A. B. (2012). *Análise Unidimensional Detalhada da Gaseificação de Bagaço de Cana em Reator de Leito Fluidizado Borbulhante*. Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE.
- Castro, A. J., Cassiano, D. A., & Ferreira, N. L. (2009). Gaseificação do bagaço de cana-de-açúcar: modelagem, análise e comparação com sistema real. *Exacta* , pp. 39-47.
- Chen, G., Andries, J., Spliethoff, H., Fang, M., & Enden, P. V. (2004). Biomass gasification integrated with pyrolysis in a circulating fluidised bed. *Solar Energy* , 76, pp. 345-349.
- Coetzer, R., & Keyser, M. (2003). Experimental design and statistical evaluation of a full-scale gasification project. *Fuel Processing Technology* , pp. 263-278.
- Corella, J., & Sanz, A. (2005). Modeling circulating fluidized bed biomass gasifiers. A pseudo-rigorous model for stationary state. *Fuel Processing Technology* , 86, pp. 1021-1053.
- Costa, A. M., & Souza-Santos, M. L. (1999). Studies on the mathematical modeling of circulation rates of particles in bubbling fluidized beds. *Powder Technology* , 103, pp. 110-116.

Costa, W. L., & Bocchi, M. L. (2012). *Aplicações do bagaço da cana-de-açúcar utilizadas na atualidade*. FATEC, Jaboticabal-SP.

de Souza Jr., M. B., & Trica, D. (2013). *Introdução a Modelagem e Dinâmica para Controle de Processos*. (1 ed. ed., Vol. 1). Rio de Janeiro: Publit.

de Souza Jr., M. B., Nemer, L. C., Barreto Jr., A. G., & Quitete, C. P. (2012). Neural Network Based Modeling and Operational Optimization of Biomass Gasification Processes. In Y. Yun, *Gasification for Practical Applications* (p. 338). InTech.

Dong, C., Jin, B., Zhong, Z., & Lan, J. (2002). Tests on co-firing of municipal solid waste and coal in a circulating fluidized bed. *Energy Conversion and Management* , 43, pp. 2189-2199.

Geldart, D. (1986). *Gas Fluidization Technology*.

Gilson. (2006). *SC-type Piston Pump Heads User's Guide*. Gilson SAS.

Gómez, E. O., Silva, E., & Cortez, L. A. (1995). Constructive features, operation and sizing of fluidized-bed gasifiers for biomass. *Energy for Sustainable Development* , pp. 52-57.

Gómez-Barea, A., & Leckner, B. (2010). Modeling of biomass gasification in fluidized bed. *Progress in Energy and Combustion Science* , 36, pp. 444-509.

Goulart, E. A., Mariotoni, C. A., & Sánchez, C. G. (1999). A Utilização da Gaseificação de Pneus Usados em Leito Fluidizado para a Produção de Energéticos. *Polímeros: Ciência e Tecnologia* , pp. 123-128.

Guo. (1997). Modeling coal gasification with a hybrid neural network. *Fuel* , pp. 1159-1164.

Hamel, S., & Krumm, W. (2001). Mathematical modelling and simulation of bubbling fluidised bed gasifiers. *Powder Technology 120* , pp. 105-112.

Huber, G. W., Iborra, S., & Corma, A. (2006). Synthesis of transportation fuels from biomass: chemistry, catalysts, and engineering. *Chem. Rev.* , pp. 106, 4044.

Kaushal, P., Abedi, J., & Mahinpey, N. (2010). A comprehensive mathematical model for biomass gasification in a bubbling fluidized bed reactor. *Fuel* , 89, pp. 3650- 3661.

Kumar, A., Eskridge, K., Jones, D., & Hanna, M. (2009). Steam-air fluidized bed gasification of distillers grain: Effects of steam to biomass ratio, equivalence ratio and gasification temperature. *Bioresource Technology* , pp. 2062-2068.

Lenis, Y., Agudelo, A., & Pérez, J. (2013). Analysis of statistical repeatability of a fixed bed downdraft biomass gasification facility. *Applied Thermal Engineering* , pp. 1006-1016.

Nemer, L. C. (2010). *Modelagem do processo de gaseificação de biomassa empregando redes neuronais*. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ.

Pérez, J., Megar, A., & Benjumea, P. (2012). Effect of operating and design parameters on the gasification/combustion process of waste biomass in fixed bed downdraft reactors: An experimental study. *Fuel* , pp. 487-496.

Siedlecki, M., Simeone, E., Jong, W. d., & Verkooijen, A. (2007). Characterization of gaseous and condensable components in the product gas obtained during steam-oxygen gasification of biomass in a 100 KWth CFB gasifier. *15th European Biomass Conference and Exhibition - From Research to Market* , pp. 1-8.

Souza-Santos. (1987). *Modelling and Simulation of Fluidized-Bed Boilers and Gasifiers for Carbonaceous Solids*. PhD thesis, University of Sheffield, Sheffield, United Kingdom.

Souza-Santos, M. L. (2012). CeSFaMB®/CSFMB© Comprehensive Simulator of Fluidized and Moving Bed Equipment.

Souza-Santos, M. L. (2010). *Solid Fuels Combustion and Gasification: modeling, simulation, and equipment operations*.

Villamil Castellanos, A. B. (2012). *Análise Unidimensional Detalhada da Gaseificação de Bagaço de Cana em Reator de Leito Fluidizado Borbulhante*. Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE.

Wu, H., Hanna, M., & Jones, D. (2012). Fluidized-bed gasification of dairy manure by Box-Behnken design. *Waste Management & Research* , pp. 506-511.

Yang, W. C. (2003). *Handbook of Fluidization and Fluid-Particle Systems*.

Apêndice I – Resultados Detalhados

Simulação	A	B	C	D	E	F	G	H	I
% O2	100	100	100	100	100	100	100	100	100
RE	0,2	0,2	0,2	0,2	0,3	0,3	0,3	0,3	0,4
Vazão gás (kg/s)	5,83E-05	5,83E-05	5,83E-05	5,83E-05	1,19E-04	1,19E-04	1,19E-04	1,19E-04	8,89E-05
Vapor (kg/s)	8,89E-05	8,89E-05	2,67E-04	2,67E-04	8,89E-05	8,89E-05	2,67E-04	2,67E-04	1,74E-04
T gás entrada (K)	673	953	673	953	673	953	673	953	813
T distribuidor (K)	841,31	895,05	1076,05	928,84	1042,74	1124,81	1013,74	1091,38	982,18
T interm. leite (K)	843,79	901,65	1079,58	931,05	1063,18	1148,62	1025,09	1101,19	993,19
T final leite (K)	845,15	903,20	1079,54	931,94	1063,11	1148,55	1025,04	1101,14	993,11
T media leite gases de entrada (K)	843,42	899,97	1078,39	930,61	1056,34	1140,66	1021,29	1097,90	989,49
Perda de carga na placa (kPa)	0,42	0,81	0,97	1,94	0,58	1,09	1,12	2,20	1,09
Perda de carga na placa (mmH2O)	43,00	83,00	99,00	198,00	59,00	112,00	115,00	224,00	112,00
Perda de carga no leite (kPa)	6,18	7,01	4,65	5,19	5,04	4,48	4,58	2,35	5,40
Perda de carga no leite (mmH2O)	631,00	715,00	474,00	530,00	515,00	458,00	468,00	240,00	551,00
Q volumétrica (m³/s)	6,18E-04	7,30E-04	1,63E-03	1,30E-03	1,24E-03	1,20E-03	1,68E-03	1,80E-03	1,22E-03
ρ (kg/m³)	0,5705	0,4887	0,3286	0,4118	0,3760	0,3444	0,3537	0,3222	0,3870
Q mássica (kg/s)	3,52E-04	3,57E-04	5,37E-04	5,33E-04	4,67E-04	4,13E-04	5,94E-04	5,79E-04	4,72E-04
Q mássica cinzas (kg/s)	1,31E-05	1,30E-05	1,36E-05	1,21E-05	1,50E-05	1,09E-05	1,24E-05	3,33E-06	1,26E-05
Cp (J/kg K)	1950,00	1974,00	2163,00	2082,00	1918,00	1907,00	2008,00	2037,00	2003,00
Q mássica CO (kg/s)	4,64E-03	6,44E-03	6,18E-03	3,66E-03	1,02E-02	7,11E-03	3,72E-03	3,42E-03	5,27E-03
Q mássica H2O (kg/s)	6,85E-03	7,64E-03	2,52E-02	2,39E-02	1,27E-02	1,39E-02	2,96E-02	3,07E-02	1,83E-02
Q mássica H2 (kg/s)	1,50E-03	1,45E-03	1,51E-03	1,63E-03	1,25E-03	8,25E-04	1,07E-03	8,44E-04	1,24E-03
Q mássica CH4 (kg/s)	2,23E-04	2,28E-04	2,04E-04	1,98E-04	1,77E-04	1,36E-05	1,03E-05	7,09E-05	1,54E-04
Q mássica CO2(kg/s)	2,14E-02	1,95E-02	2,02E-02	2,36E-02	2,20E-02	1,93E-02	2,48E-02	2,27E-02	2,19E-02
Q mássica alcatrão (kg/s)	2,57E-04	6,24E-06	0,00E+00	1,01E-05	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00

<u>Simulação</u>	<u>A</u>	<u>B</u>	<u>C</u>	<u>D</u>	<u>E</u>	<u>F</u>	<u>G</u>	<u>H</u>	<u>I</u>
Base total mássica %									
Ar	0	0	0	0	0	0	0	0	0
H2	4,2666	4,0807	2,8159	3,0588	2,679	1,9956	1,8075	1,4577	2,6311
H2O	19,4389	21,4427	46,9037	44,7884	27,1883	33,5715	49,8079	52,9447	38,7454
H2S	0,1507	0,1481	0,0998	0,098	0,1127	0,0852	0,0616	0,0516	0,0902
NH3	0,286	0,2821	0,1767	0,1824	0,2021	0,1253	0,0916	0,0858	0,1703
NO	0,0009	0,0033	0,0147	0,0102	0,001	0	0,0238	0,0041	0,0122
NO2	0,0248	0,0329	0	0,0148	0,0001	0	0,003	0	0,0081
N2	0,0171	0,0257	0,0289	0,0211	0,09	0,1271	0,074	0,087	0,1275
N2O	0	0	0	0	0	0	0	0	0
O2	0	0	0	0	0	0	0	0	0
SO2	0,0642	0,0765	0,0491	0,0506	0,1237	0,1394	0,0957	0,1009	0,0972
CO	13,1605	18,0548	11,5038	6,8551	21,8818	17,2111	6,2598	5,9043	11,1687
CO2	60,7752	54,7032	37,675	44,2037	47,0085	46,7109	41,7567	39,13	46,3234
HCN	0,0023	0,0005	0,0004	0,0001	0,0013	0,0008	0,0001	0,0001	0,0003
CH4	0,6318	0,6391	0,3798	0,3721	0,3784	0,0328	0,0173	0,1224	0,327
C2H4	0,1572	0,1684	0,1229	0,1114	0,1153	0,0002	0,0009	0,0405	0,1025
C2H6	0,126	0,1391	0,0981	0,0918	0,0932	0	0,0001	0,0302	0,084
C3H6	0,0084	0,0093	0,0065	0,0061	0,0062	0	0	0,002	0,0056
C3H8	0,0087	0,0094	0,0068	0,0062	0,0064	0	0	0,0023	0,0057
C6H6	0,1512	0,1669	0,1177	0,1102	0,1119	0	0,0001	0,0364	0,1008
Tar	0,7297	0,0175	0	0,019	0	0	0	0	0
H-Tar	0	0	0	0	0	0	0	0	0

<u>Simulação</u>	<u>A</u>	<u>B</u>	<u>C</u>	<u>D</u>	<u>E</u>	<u>F</u>	<u>G</u>	<u>H</u>	<u>I</u>
Base total molar %									
Ar	0	0	0	0	0	0	0	0	0
H2	41,2798	39,0839	26,276	28,6256	28,0334	21,766	18,4981	15,1146	26,3403
H2O	21,0466	22,9823	48,9773	46,9048	31,8371	40,9753	57,0415	61,4332	43,4064
H2S	0,0862	0,0839	0,0551	0,0543	0,0697	0,055	0,0373	0,0317	0,0534
NH3	0,3275	0,3199	0,1952	0,202	0,2504	0,1618	0,111	0,1053	0,2018
NO	0,0006	0,0021	0,0092	0,0064	0,0007	0	0,0163	0,0029	0,0082
NO2	0,0105	0,0138	0	0,0061	0	0	0,0013	0	0,0036
N2	0,0119	0,0177	0,0194	0,0142	0,0678	0,0998	0,0545	0,0649	0,0919
N2O	0	0	0	0	0	0	0	0	0
O2	0	0	0	0	0	0	0	0	0
SO2	0,0195	0,023	0,0144	0,0149	0,0407	0,0478	0,0308	0,0329	0,0306
CO	9,1645	12,4461	7,726	4,6173	16,4801	13,511	4,6108	4,4063	8,0475
CO2	26,9355	24,0002	16,1038	18,9495	22,5329	23,3376	19,5752	18,5857	21,2433
HCN	0,0016	0,0004	0,0003	0,0001	0,001	0,0006	0,0001	0,0001	0,0002
CH4	0,7682	0,7691	0,4453	0,4375	0,4976	0,045	0,0222	0,1595	0,4113
C2H4	0,1093	0,1159	0,0824	0,0749	0,0867	0,0002	0,0006	0,0302	0,0737
C2H6	0,0817	0,0893	0,0614	0,0576	0,0654	0	0	0,021	0,0564
C3H6	0,0039	0,0043	0,0029	0,0027	0,0031	0	0	0,001	0,0027
C3H8	0,0039	0,0041	0,0029	0,0026	0,0031	0	0	0,0011	0,0026
C6H6	0,0377	0,0412	0,0284	0,0266	0,0302	0	0	0,0097	0,0261
Tar	0,111	0,0026	0	0,0028	0	0	0	0	0
H-Tar	0	0	0	0	0	0	0	0	0

<u>Simulação</u>	<u>A</u>	<u>B</u>	<u>C</u>	<u>D</u>	<u>E</u>	<u>F</u>	<u>G</u>	<u>H</u>	<u>I</u>
Base seca mássica %									
Ar	0	0	0	0	0	0	0	0	0
H2	5,2961	5,1946	5,3035	5,5402	3,6794	3,0042	3,6012	3,0979	4,2954
H2O	0	0	0	0	0	0	0	0	0
H2S	0,187	0,1885	0,188	0,1775	0,1547	0,1283	0,1228	0,1097	0,1473
NH3	0,355	0,3591	0,3328	0,3303	0,2776	0,1886	0,1826	0,1823	0,2781
NO	0,0012	0,0042	0,0277	0,0185	0,0014	0,0001	0,0473	0,0087	0,0199
NO2	0,0308	0,0419	0,0001	0,0269	0,0001	0	0,0059	0	0,0133
N2	0,0212	0,0327	0,0544	0,0382	0,1236	0,1913	0,1474	0,1849	0,2082
N2O	0	0	0	0	0	0	0	0	0
O2	0	0	0	0	0	0	0	0	0
SO2	0,0796	0,0973	0,0925	0,0916	0,1699	0,2099	0,1906	0,2143	0,1587
CO	16,336	22,9829	21,6659	12,416	30,0526	25,9092	12,4717	12,5476	18,2332
CO2	75,4398	69,6348	70,956	80,0623	64,5618	70,3175	83,1938	83,1576	75,6243
HCN	0,0028	0,0006	0,0007	0,0002	0,0018	0,0011	0,0002	0,0002	0,0004
CH4	0,7843	0,8135	0,7153	0,6739	0,5197	0,0494	0,0344	0,2602	0,5338
C2H4	0,1951	0,2143	0,2315	0,2018	0,1583	0,0004	0,0017	0,0861	0,1673
C2H6	0,1564	0,177	0,1848	0,1663	0,128	0	0,0001	0,0642	0,1372
C3H6	0,0104	0,0118	0,0123	0,0111	0,0085	0	0	0,0043	0,0091
C3H8	0,0108	0,0119	0,0129	0,0112	0,0088	0	0,0001	0,0048	0,0093
C6H6	0,1877	0,2124	0,2217	0,1995	0,1537	0	0,0002	0,0773	0,1646
Tar	0,9058	0,0223	0	0,0345	0	0	0	0	0
H-Tar	0	0	0	0	0	0	0	0	0

<u>Simulação</u>	<u>A</u>	<u>B</u>	<u>C</u>	<u>D</u>	<u>E</u>	<u>F</u>	<u>G</u>	<u>H</u>	<u>I</u>
Base seca molar %									
Ar	0	0	0	0	0	0	0	0	0
H2	52,2837	50,7467	51,4987	53,9137	41,127	36,876	43,0605	39,1908	46,5429
H2O	0	0	0	0	0	0	0	0	0
H2S	0,1092	0,1089	0,108	0,1022	0,1023	0,0932	0,0868	0,0821	0,0944
NH3	0,4149	0,4153	0,3825	0,3805	0,3673	0,2741	0,2584	0,273	0,3567
NO	0,0008	0,0028	0,0181	0,0121	0,001	0	0,038	0,0074	0,0145
NO2	0,0133	0,0179	0	0,0115	0,0001	0	0,0031	0	0,0063
N2	0,0151	0,023	0,038	0,0268	0,0994	0,169	0,1268	0,1683	0,1623
N2O	0	0	0	0	0	0	0	0	0
O2	0	0	0	0	0	0	0	0	0
SO2	0,0247	0,0299	0,0283	0,0281	0,0598	0,0811	0,0717	0,0853	0,0541
CO	11,6074	16,16	15,1423	8,6963	24,1776	22,8903	10,7332	11,4251	14,2198
CO2	34,1157	31,162	31,562	35,6896	33,0574	39,5387	45,5678	48,1908	37,5365
HCN	0,0021	0,0005	0,0005	0,0001	0,0015	0,001	0,0001	0,0002	0,0004
CH4	0,973	0,9987	0,8728	0,8241	0,73	0,0762	0,0518	0,4136	0,7268
C2H4	0,1384	0,1505	0,1615	0,1411	0,1272	0,0003	0,0015	0,0783	0,1303
C2H6	0,1035	0,1159	0,1203	0,1085	0,096	0	0,0001	0,0544	0,0997
C3H6	0,0049	0,0055	0,0057	0,0052	0,0046	0	0	0,0026	0,0047
C3H8	0,0049	0,0053	0,0057	0,005	0,0045	0	0,0001	0,0028	0,0046
C6H6	0,0478	0,0536	0,0556	0,0501	0,0443	0	0	0,0252	0,046
Tar	0,1406	0,0034	0	0,0053	0	0	0	0	0
H-Tar	0	0	0	0	0	0	0	0	0

<u>Simulação</u>	<u>J</u>	<u>K</u>	<u>L</u>	<u>M</u>	<u>N</u>	<u>O</u>	<u>P</u>	<u>Q</u>
% O2	100	100	100	100	100	100	100	100
RE	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3
Vazão gás (kg/s)	9,78E-05	9,78E-05	9,78E-05	9,78E-05	8,00E-05	8,00E-05	8,00E-05	8,00E-05
Vapor (kg/s)	1,87E-04	1,87E-04	1,69E-04	1,69E-04	1,87E-04	1,87E-04	1,69E-04	1,69E-04
T gás entrada (K)	809	817	809	817	809	817	809	817
T distribuidor (K)	1042,22	1044,29	1047,04	1048,26	977,65	980,43	981,73	983,62
T interm. leito (K)	1057,70	1059,82	1063,50	1064,55	988,98	991,26	994,35	995,86
T final leito (K)	1057,64	1059,76	1063,44	1064,48	988,90	991,19	994,28	995,78
T media leito gases de entrada (K)	1052,52	1054,62	1057,99	1059,10	985,18	987,63	990,12	991,75
Perda de carga na placa (kPa)	1,17	1,19	1,09	1,11	1,11	1,13	1,03	1,05
Perda de carga na placa (mmH2O)	120,00	122,00	112,00	114,00	113,00	115,00	105,00	107,00
Perda de carga no leito (kPa)	4,51	4,41	4,62	4,60	5,29	5,23	5,36	5,37
Perda de carga no leito (mmH2O)	461,00	450,00	472,00	470,00	540,00	534,00	548,00	548,00
Q volumétrica (m ³ /s)	1,38E-03	1,39E-03	1,33E-03	1,33E-03	1,23E-03	1,24E-03	1,18E-03	1,19E-03
ρ (kg/m ³)	0,3555	0,3538	0,3562	0,3561	0,3850	0,3841	0,3865	0,3856
Q mássica (kg/s)	4,91E-04	4,90E-04	4,73E-04	4,73E-04	4,74E-04	4,74E-04	4,57E-04	4,57E-04
Q mássica cinzas (kg/s)	1,12E-05	1,09E-05	1,14E-05	1,13E-05	1,22E-05	1,21E-05	1,22E-05	1,23E-05
Cp (J/kg K)	2015,00	2017,00	2005,00	2005,00	2031,00	2032,00	2022,00	2023,00
Q mássica CO (kg/s)	5,53E-03	5,53E-03	5,92E-03	5,91E-03	5,28E-03	5,29E-03	5,64E-03	5,67E-03
Q mássica H2O (kg/s)	2,07E-02	2,07E-02	1,91E-02	1,91E-02	1,88E-02	1,88E-02	1,72E-02	1,72E-02
Q mássica H2 (kg/s)	1,15E-03	1,15E-03	1,14E-03	1,14E-03	1,32E-03	1,32E-03	1,30E-03	1,30E-03
Q mássica CH4 (kg/s)	2,33E-05	2,35E-05	2,21E-05	2,24E-05	1,51E-04	1,58E-04	1,54E-04	1,61E-04
Q mássica CO2(kg/s)	2,15E-02	2,14E-02	2,10E-02	2,10E-02	2,15E-02	2,15E-02	2,10E-02	2,10E-02
Q mássica alcatrão (kg/s)	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00

Simulação	J	K	L	M	N	O	P	Q
Base total mássica %								
Ar	0	0	0	0	0	0	0	0
H2	2,3519	2,3402	2,4043	2,4014	2,7834	2,7744	2,8413	2,8348
H2O	42,1461	42,2733	40,3051	40,3347	39,6442	39,6764	37,7226	37,7301
H2S	0,086	0,0857	0,0891	0,0889	0,0947	0,0945	0,0985	0,0984
NH3	0,1299	0,1296	0,1342	0,1342	0,1746	0,1751	0,1812	0,1822
NO	0,0025	0,0026	0,0019	0,0018	0,0102	0,0109	0,0083	0,0082
NO2	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0069	0,0061	0,0052	0,0047
N2	0,0862	0,0872	0,0939	0,0976	0,0513	0,0508	0,0601	0,0555
N2O	0	0	0	0	0	0	0	0
O2	0	0	0	0	0	0	0	0
SO2	0,0913	0,0914	0,0955	0,0956	0,0862	0,0867	0,0894	0,0898
CO	11,2547	11,2872	12,4967	12,48	11,131	11,1564	12,355	12,4049
CO2	43,795	43,6451	44,3268	44,3119	45,414	45,3367	46,0027	45,9244
HCN	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003
CH4	0,0475	0,048	0,0466	0,0474	0,3191	0,333	0,3374	0,3526
C2H4	0,0056	0,006	0,0039	0,0044	0,0977	0,1025	0,1025	0,1078
C2H6	0,0011	0,0013	0,0006	0,0007	0,0798	0,084	0,0837	0,0883
C3H6	0,0001	0,0001	0	0	0,0053	0,0056	0,0056	0,0059
C3H8	0,0003	0,0003	0,0002	0,0002	0,0054	0,0057	0,0057	0,006
C6H6	0,0014	0,0015	0,0007	0,0008	0,0957	0,1009	0,1005	0,106
Tar	0	0	0	0	0	0	0	0
H-Tar	0	0	0	0	0	0	0	0

Simulação	J	K	L	M	N	O	P	Q
Base total molar %								
Ar	0	0	0	0	0	0	0	0
H2	23,7067	23,5933	24,33	24,3036	27,3141	27,238	27,9848	27,9299
H2O	47,5409	47,6932	45,6428	45,6812	43,5351	43,5898	41,578	41,5988
H2S	0,0513	0,0511	0,0533	0,0532	0,055	0,0549	0,0574	0,0574
NH3	0,155	0,1547	0,1608	0,1607	0,2028	0,2035	0,2113	0,2125
NO	0,0017	0,0017	0,0013	0,0012	0,0067	0,0072	0,0055	0,0054
NO2	0	0	0	0	0,003	0,0026	0,0022	0,002
N2	0,0626	0,0632	0,0684	0,0711	0,0362	0,0359	0,0426	0,0393
N2O	0	0	0	0	0	0	0	0
O2	0	0	0	0	0	0	0	0
SO2	0,029	0,029	0,0304	0,0305	0,0266	0,0268	0,0277	0,0279
CO	8,1653	8,1904	9,1019	9,0907	7,8618	7,8832	8,7585	8,7965
CO2	20,2219	20,1564	20,5479	20,5431	20,4144	20,3887	20,7555	20,7264
HCN	0,0002	0,0002	0,0003	0,0003	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002
CH4	0,0601	0,0609	0,0593	0,0603	0,3935	0,4108	0,4176	0,4365
C2H4	0,0041	0,0044	0,0029	0,0032	0,0689	0,0723	0,0726	0,0763
C2H6	0,0008	0,0009	0,0004	0,0005	0,0525	0,0553	0,0553	0,0584
C3H6	0	0	0	0	0,0025	0,0026	0,0026	0,0028
C3H8	0,0001	0,0002	0,0001	0,0001	0,0024	0,0026	0,0026	0,0027
C6H6	0,0004	0,0004	0,0002	0,0002	0,0242	0,0256	0,0255	0,027
Tar	0	0	0	0	0	0	0	0
H-Tar	0	0	0	0	0	0	0	0

Simulação	J	K	L	M	N	O	P	Q
Base seca mássica %								
Ar	0	0	0	0	0	0	0	0
H2	4,0652	4,0539	4,0276	4,0248	4,6117	4,5993	4,5623	4,5525
H2O	0	0	0	0	0	0	0	0
H2S	0,1487	0,1485	0,1492	0,149	0,157	0,1567	0,1582	0,158
NH3	0,2245	0,2245	0,2249	0,2249	0,2892	0,2903	0,291	0,2926
NO	0,0043	0,0045	0,0033	0,003	0,0169	0,018	0,0133	0,0132
NO2	0,0002	0,0002	0,0002	0,0001	0,0114	0,0101	0,0084	0,0076
N2	0,1491	0,151	0,1573	0,1636	0,085	0,0841	0,0965	0,0891
N2O	0	0	0	0	0	0	0	0
O2	0	0	0	0	0	0	0	0
SO2	0,1579	0,1584	0,16	0,1603	0,1428	0,1436	0,1436	0,1443
CO	19,4537	19,5529	20,9343	20,9166	18,4424	18,4943	19,8387	19,9211
CO2	75,6993	75,6065	74,2556	74,2673	75,2438	75,1558	73,8673	73,7506
HCN	0,0005	0,0005	0,0006	0,0006	0,0004	0,0004	0,0005	0,0005
CH4	0,082	0,0832	0,0781	0,0795	0,5288	0,5521	0,5418	0,5662
C2H4	0,0097	0,0104	0,0066	0,0074	0,1619	0,17	0,1646	0,1731
C2H6	0,002	0,0022	0,001	0,0012	0,1322	0,1393	0,1344	0,1419
C3H6	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0088	0,0093	0,009	0,0095
C3H8	0,0005	0,0006	0,0004	0,0004	0,009	0,0094	0,0091	0,0096
C6H6	0,0024	0,0027	0,0012	0,0014	0,1586	0,1672	0,1613	0,1703
Tar	0	0	0	0	0	0	0	0
H-Tar	0	0	0	0	0	0	0	0

Simulação	J	K	L	M	N	O	P	Q
Base seca molar %								
Ar	0	0	0	0	0	0	0	0
H2	45,1908	45,1057	44,7595	44,7425	48,3736	48,2856	47,9011	47,8242
H2O	0	0	0	0	0	0	0	0
H2S	0,0978	0,0978	0,0981	0,098	0,0974	0,0973	0,0983	0,0982
NH3	0,2955	0,2957	0,2958	0,2959	0,3591	0,3608	0,3616	0,3639
NO	0,0032	0,0033	0,0024	0,0022	0,0119	0,0127	0,0094	0,0093
NO2	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0052	0,0047	0,0038	0,0035
N2	0,1192	0,1209	0,1258	0,1309	0,0642	0,0636	0,0729	0,0673
N2O	0	0	0	0	0	0	0	0
O2	0	0	0	0	0	0	0	0
SO2	0,0552	0,0554	0,056	0,0561	0,0471	0,0475	0,0475	0,0477
CO	15,565	15,6583	16,7447	16,7359	13,9233	13,9748	14,9918	15,0622
CO2	38,548	38,5349	37,8016	37,8196	36,1541	36,1437	35,5269	35,4898
HCN	0,0004	0,0004	0,0005	0,0005	0,0003	0,0003	0,0004	0,0004
CH4	0,1146	0,1164	0,109	0,111	0,697	0,7283	0,7148	0,7474
C2H4	0,0078	0,0083	0,0053	0,0059	0,122	0,1282	0,1242	0,1307
C2H6	0,0015	0,0017	0,0007	0,0009	0,093	0,0981	0,0946	0,0999
C3H6	0,0001	0,0001	0	0	0,0044	0,0047	0,0045	0,0048
C3H8	0,0003	0,0003	0,0002	0,0002	0,0043	0,0045	0,0044	0,0046
C6H6	0,0007	0,0008	0,0003	0,0004	0,0429	0,0453	0,0437	0,0462
Tar	0	0	0	0	0	0	0	0
H-Tar	0	0	0	0	0	0	0	0