

EFEITOS DE VARIÁVEIS DE ENTRADA NO DESEMPENHO DE UM GASEIFICADOR DE BAGAÇO DE CANA-DE-AÇÚCAR

João Paulo Rodrigues Féres

Monografia em Engenharia Química

Orientadores:

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

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

Março de 2014

EFEITOS DE VARIÁVEIS DE ENTRADA NO DESEMPENHO DE UM GASEIFICADOR DE BAGAÇO DE CANA-DE-AÇÚCAR

João Paulo Rodrigues Féres

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:

Verônica Maria de Araújo Calado, D.Sc.

Thiago de Sá Feital, D.Sc.

José Márcio Nikiel, M.Sc.

Orientado por:

Maurício Bezerra de Souza Jr., D.Sc.

Amaro Gomes Barreto Jr., D.Sc.

Rio de Janeiro, RJ – Brasil.

Março de 2014

Féres, João Paulo Rodrigues.

Efeitos de variáveis de entrada no desempenho de um gaseificador de bagaço de canade-açúcar/ João Paulo Rodrigues Féres. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2014.

xi, 83 p.; il.

(Monografia) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2014.

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

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

Dedico este trabalho aos meus familiares por sempre acreditar em mim e por todo carinho, esforço e orações realizados durante esses anos para que esse sonho fosse concretizado.

AGRADECIMENTOS

Agradeço em primeiro lugar a Deus, acima de tudo, porque através Dele, que iluminou o meu caminho durante esta longa jornada, pude alcançar e conquistar esse sonho. Sem Ele creio que nada disso seria possível.

Ao Professor Mauricio Bezerra de Souza Jr. por todo aprendizado adquirido durante esse período na elaboração deste trabalho. Obrigado pelo apoio, pelo incentivo nesta reta final, pela paciência e compreensão, auxiliando-me com sua imensa sabedoria de forma imprescindível para a elaboração deste trabalho. Agradeço também pela confiança e oportunidade que me concedeu no projeto desenvolvido através da COPPETEC.

Ao Professor Amaro Gomes Barreto Jr. por toda sua paciência e dedicação comigo. Em diversos momentos de dúvidas e esclarecimentos sempre esteve solícito a me atender e me ajudar. Obrigado pela confiança que depositou em mim, pelos momentos de apropriação de conhecimento que obtive sempre com as "dúvidas" à porta de sua sala e acredite esse não será o último agradecimento que farei a sua pessoa, pois lhe serei grato para sempre.

Aos amigos de Niterói em especial ao Georges e Samuel pela amizade e companheirismo desde os primórdios tempos de pré-vestibular até os dias atuais.

Aos amigos de Muriaé imigrantes também no Rio e/ou Niterói, em especial a Leticia, Lucas, Henrique e Marina, por todo apoio e amizade que deram e foram desde a nossa chegada ao estado do Rio de Janeiro até hoje.

Aos amigos da Universidade em especial ao Leonardo, Fernando, João Corrêa, Thaíssa, Virgílio e Samir, pela grande amizade de vocês, ora nos momentos de dedicação com os estudos, ora nos momentos de descontração e lazer.

Aos velhos e eternos amigos de Muriaé, em especial ao Ronaldo, Afonso, Mateus, Rodrigo e Miguel por vocês serem simplesmente estes inesquecíveis e inseparáveis amigos. Obrigado por essa nossa amizade histórica. À minha avó Dilene, pessoa muito importante na minha vida a quem também dedico esse trabalho. Apesar da grande distância e das muitas visitas corridas posso dizer que sem seu carinho, sua amizade e suas orações muito disso não estaria acontecendo.

Ao meu grande amigo e irmão Luiz Fernando. Convivemos durante longos anos em Niterói porem a vida fez com que tomássemos destinos distintos. Você voltou pra Muriaé, mas mesmo de longe sinto toda a energia, vibração, torcida que transmite para mim. Obrigado por todos os conselhos que me deu enquanto estávamos juntos, pelo apoio, orações, pelos momentos de angustia juntos, pelos momentos de alegria juntos e por tudo de bom que vivemos em Niterói. Você faz grande parte desse sonho.

E por fim gostaria de agradecer aos melhores amigos que já tive na minha vida. Simeão e Tereza, vocês sempre foram e sempre serão para mim um espelho do que é ter garra, ter fé, muita perseverança e humildade. Todos os ensinamentos que me proporcionaram até hoje levei e continuarei levando por toda minha vida. Obrigado por vocês serem os maiores incentivadores e idealizadores deste sonho. Tenho toda propriedade em dizer que sem vocês, nada disso estaria por acontecer. Vocês foram responsáveis por moldar o meu caráter e por eu ser quem sou hoje. Agradeço a vocês por apoiarem todas as minhas decisões, souberam conviver à distância e perdão pelas minhas visitas corridas durante minha formação acadêmica. Pai e mãe, perto ou distante, amo muito vocês incondicionalmente e obrigado por tudo. Resumo da Monografia apresentada à Escola de Química como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Engenheiro Químico.

EFEITOS DE VARIÁVEIS DE ENTRADA NO DESEMPENHO DE UM GASEIFICADOR DE BAGAÇO DE CANA-DE-AÇÚCAR

João Paulo Rodrigues Féres

Março, 2014

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

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

No mundo atual, as rotas tecnológicas alternativas, utilizando fontes renováveis de energia, despontam como as mais promissoras para substituírem o uso de combustíveis fósseis. O processo de gaseificação de biomassa vem sendo amplamente difundido, principalmente em sistemas de cogeração de energia, devido a sua combustão mais limpa e uma eficiência satisfatória na transformação em produtos com grande valor agregado. O processo de gaseificação é extremamente complexo devido à ocorrência de uma extensa gama de diferentes reações simultâneas e a diversos tipos de fenômenos, como transferência de massa e calor, complicando a sua modelagem. Nesse contexto, surge o simulador CeSFaMB[™] que agrega toda essa complexa modelagem e permite prever as características dos produtos obtidos no processo. No presente trabalho, foram feitas simulações no CeSFaMB™, variando as vazões mássicas de cada corrente de entrada (oxigênio, vapor d'água e biomassa), de acordo com um planejamento estatístico fatorial, de forma a investigar seus efeitos sobre a composição dos gases produzidos. O trabalho se baseou em condições de projeto de um gaseificador em escala piloto, de leito fluidizado, que opera a pressão ambiente e temperatura em torno de 900°C. Os resultados da simulação foram analisados usando-se o software Statistica, versão10. Constatou-se que a vazão de biomassa (QB) é relevante, possuindo relação direta com as concentrações dos gases hidrogênio e monóxido de carbono produzidos.

ÍNDICE

1	In	trodu	odução1	
	1.1	Mo	tivação	1
	1.2	Obj	etivos	4
	1.3	Estr	utura do Trabalho	5
2	R	evisã	o Bibliográfica	6
	2.1	Intr	odução à Gaseificação	6
	2.2	Etaj	pas do Processo	7
	2.3	A ir	nfluência da biomassa no processo	. 10
	2.4	Tip	os de Agentes Gaseificadores	. 12
	2.5	Prir	cipais Equipamentos	. 14
	2.4	5.1	Leito Fixo	. 14
	2.4	5.2	Leito Fluidizado	. 17
	2.6	Flui	dização	. 18
	2.5	Cin	ética	. 22
3	Μ	letodo	ologia	.25
	3.1	Mo	delagem	. 25
	3.2	Sim	ulações no CeSFaMB™	. 26
	3.2	2.1	Dados geométricos e físicos do equipamento	. 27
	3.2	2.2	Correntes principais	. 29
	3.3	Equ	ipamento	. 33
	3.4	Dad	los de Saída (<i>output</i>)	. 34
	3.5	Plar	nejamento experimental	. 34
	3.5	5.1	Análise qualitativa das variáveis do processo	. 34
	3.5	5.2	Análise das variáveis independentes	. 37
	3.5	5.3	Análise das variáveis dependentes	. 41
4	R	esulta	idos e discussões	.43
	4.1	O p	rograma para análise dos resultados	. 43
	4.2	Res	ultado para as análises estatísticas	. 45
	4.2	2.1	Análise para o gás hidrogênio (H ₂)	. 46
	4.2	2.2	Análise para o gás Monóxido de Carbono (CO)	. 48
	4.2	2.3	Análise para o gás Dióxido de Carbono (CO ₂)	. 50

	4.2.4	Análise para a água (H ₂ O)	. 53	
	4.2.5	Análise para a perda de carga (ΔP)	. 55	
4	.3 Res	ultados para verificação do modelo	. 56	
	4.3.1	Avaliação para o H ₂	. 56	
	4.3.2	Avaliação para o CO	. 58	
	4.3.3	Avaliação para o CO ₂	. 59	
	4.3.4	Avaliação para a H ₂ O	61	
5	Conclu	sões e sugestões para trabalhos futuros	64	
Bił	oliografi	a	67	
Ap	êndice A	A	71	
Р	Parâmetros de convergência numérica71			
An	Anexo I73			

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1: Matriz Energética Mundial. Fonte: MME, relatório de 2009 1
Figura 2: Energia no Brasil. Fonte: Ministério de Minas e Energia (2008) 2
Figura 3: Esquema simplificado de um Gaseificador de Leito Fixo Contracorrente.
(Nemer, 2010)
Figura 4: Esquema simplificado de um Gaseificador de Leito Fixo Concorrente.
(Nemer, 2010)
Figura 5: Os dois tipos de Gaseificador em leito fluidizado. (Nemer, 2010) 18
Figura 6: Diferentes estados das partículas durante a fluidização. (Castellanos, 2012). 20
Figura 7: Gráfico $\Delta P \propto Velocidade em diferentes regimes de fluidização. Adaptada de$
(Castellanos, 2012)
Figura 8: Esquema de um reator de leito fluidizado. (Castellanos 2012)
Figura 9: Cubo representando o planejamento experimental
Figura 10: Representação do diagrama de Pareto para o gás hidrogênio 47
Figura 11: Representação do diagrama de Pareto para o monóxido de carbono 49
Figura 12: Representação do diagrama de Pareto para o dióxido de carbono 52
Figura 13: Representação do diagrama de Pareto para a água 54
Figura 14: Representação do histograma do resíduo bruto para o gás hidrogênio 57
Figura 15: Probabilidade Normal do erro bruto para o gás hidrogênio 57
Figura 16: Representação do histograma do erro bruto para o monóxido de carbono 58
Figura 17: Probabilidade Normal do erro bruto para o monóxido de carbono 59
Figura 18: Histograma do erro bruto para o dióxido de carbono 60
Figura 19: Probabilidade Normal do erro bruto para o dióxido de carbono 60
Figura 20: Histograma do erro bruto para a água61
Figura 21: Probabilidade normal do erro bruto para a água
Figura 22: Teste de Shapiro Wilk para o gás hidrogênio 63
Figura 23: Teste de Kolmogorov-Smirnov para o gás hidrogênio
Figura 24: Interface inicial do CeSFaMB [™] com os primeiros parâmetros de
convergência numérica

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1: Poder calorífico dos diferentes agentes gaseificadores. (Castellanos, 2012	2).12
Tabela 2: Dados utilizados em todas as simulações neste trabalho. (Castellanos, 20	12).
	28
Tabela 3: Dados referentes à alimentação do combustível sólido. (Castellanos, 2012)	2). 30
Tabela 4: Condições ambientes. (Castellanos, 2012)	30
Tabela 5: Análise Imediata. (Castellanos, 2012)	31
Tabela 6: Análise Elementar. (Castellanos, 2012)	31
Tabela 7: Esfericidade e densidade das partículas. (Castellanos, 2012)	31
Tabela 8: Distribuição de tamanho de partícula para o combustível. (Castellanos, 2	012).
Tabela 9: Distribuição de tamanho para o material particulado no leito (inerte).	32
(Castellanos, 2012).	32
Tabela 10: Plano das variáveis segundo Cruz et al. (2013)	38
Tabela 11: Planejamento Experimental	39
Tabela 12: Limites do plano experimental em torno do ponto central	40
Tabela 13: Limites da faixa normal e da faixa em torno do ponto central, sendo tod	os
eles normalizados	41
Tabela 14: Denominação dos pontos simulados no CeSFaMB [™]	44
Tabela 15: Análise de dados referentes ao gás hidrogênio	46
Tabela 16: Análise ANOVA para o gás hidrogênio	46
Tabela 17: Apenas efeitos significantes para o gás hidrogênio	48
Tabela 18: Análise de dados referentes ao monóxido de carbono	48
Tabela 19: Análise ANOVA para o monóxido de carbono	48
Tabela 20: Apenas efeitos relevantes para o monóxido de carbono	50
Tabela 21: Análise de dados referentes ao dióxido de carbono	50
Tabela 22: Análise ANOVA para o dióxido de carbono	51
Tabela 23: Apenas efeitos relevantes para o dióxido de carbono	52
Tabela 24: Análise de dados referente a água.	53
Tabela 25: Análise ANOVA para a água.	53
Tabela 26: Apenas efeitos relevantes para a H ₂ O	54
Tabela 27: Análise de dados referente a queda de pressão (ΔP)	55
Tabela 28: Parâmetros de convergência numérica.	73

1 Introdução

1.1 Motivação

Os esforços para o desenvolvimento de tecnologias energéticas 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). Estes, além de serem não renováveis, ao serem queimados produzem gases que contribuem para o aquecimento global.

Como principal combustível fóssil, que alimenta todo setor industrial mundial além de ser uma fonte estratégica de recurso para um país, está o petróleo. Como pode ser notado através da Figura 1, mais da metade da matriz energética mundial provém de combustíveis fósseis e, dentre eles, o principal é o petróleo.



Figura 1: Matriz Energética Mundial. Fonte: MME, relatório de 2009.

No Brasil, o petróleo e seus derivados ainda são os responsáveis pela maior parte da demanda energética. A Figura 2 mostra que no país a maior parcela de toda matriz energética provém do petróleo. Porém, um dado interessante pode ser observado na Figura 2: aproximadamente 30% da demanda energética do país provêm de fontes renováveis de energia, valor bem mais expressivo que o correspondente mundial.



Figura 2: Energia no Brasil. Fonte: Ministério de Minas e Energia (2008).

Com o agravante da poluição ambiental causada pelos combustíveis fósseis e a preocupação na substituição dos mesmos por fontes alternativas de combustíveis, é que surge no cenário mundial a presença de fontes renováveis como fonte de energia. Uma série de fontes renováveis pode ser citada e as principais são: o sol (energia solar), o vento (energia eólica) e o carbono orgânico. Em relação a esta última, a principal fonte de carbono orgânico pode ser obtida em materiais como lenha, o bagaço de cana-de-açúcar, cavacos de madeira. Assim sendo, pode-se definir que biomassa é formada a partir de seres vivos como plantas e animais; e se dá a partir do momento em que nascem ou são formados (Basu, 2010).

São diversas as fontes de biomassa utilizadas como fonte de energia e estas vão desde um simples lixo doméstico, passando por fontes de origem vegetal como a madeira, indo até resíduos de cultivos agrícolas. Dependendo da região em questão, há uma série de resíduos diversificados com características diferentes, que podem ser aproveitados como fonte de energia dentre os quais podem ser citados a casca de arroz, a mamona, a palha de milho, as cascas de castanhas, o coco da Bahia, o coco de babaçu, o dendê, as cascas de laranjas etc. Dentre as principais fontes de biomassa, o Brasil merece um grande destaque em relação ao cultivo de cana-de-açúcar. O país é o maior produtor mundial desta *commodity* (Macedo, 2007). Através desta, um dos principais rejeitos aproveitados como fonte de geração de energia é o bagaço da cana.

Na transformação de biomassa em energia térmica, existem diversas tecnologias e processos de conversão que vão de uma simples combustão ou queima, até processos físico-químicos e bioquímicos mais complexos para obtenção de combustíveis líquidos e gasosos como, por exemplo, a gaseificação. Além desta, há outras rotas tecnológicas como transesterificação, fermentação, digestão anaeróbia e a pirólise, porém no presente trabalho será abordada a tecnologia do processo de gaseificação.

Uma vantagem da utilização da biomassa como fonte de energia é quanto à emissão de gases na atmosfera. As emissões não contribuem para o efeito estufa e não emite dióxido de enxofre (SO₂), o que diminui os problemas relacionados à chuva ácida. Outras vantagens importantes são: as cinzas geradas são menos agressivas ao meio ambiente comparado às emitidas pelos combustíveis fósseis, não causam problemas de corrosão em equipamentos como fornos e caldeiras, sua aquisição é de baixo custo e, de forma geral, provocam um menor risco ao meio ambiente. Uma desvantagem na utilização desta fonte como combustível esta relacionada ao nitrogênio. Como esta possui este elemento em sua constituição, a sua exposição em altas temperaturas proporcionará a formação de compostos indesejáveis, que contribuem para a poluição atmosférica, como o NO_x ,

Apesar de o país possuir uma diversa gama de variados tipos de biomassa, o presente trabalho irá destacar a utilização do bagaço de cana-de-açúcar como matéria prima na conversão em energia térmica, uma vez que o Brasil é um dos maiores produtores de cana-de-açúcar no mundo e, consequentemente, dos seus resíduos (Macedo, 2007).

Hoje muitas usinas utilizam os resíduos da indústria canavieira dentro das próprias usinas de açúcar e destilarias na produção de eletricidade, que visa suprir a demanda de energia das mesmas. Porém, alternativamente à cogeração dentro das próprias usinas e destilarias, o bagaço, um dos principais resíduos, pode ter uso energético fora delas, como: insumo volumoso para ração animal, fabricação de papel de bagaço, fabricação de elementos estruturais, hidrólise para produção de álcool e em novas rotas tecnológicas como o processo da gaseificação (Andrade, 2007).

1.2 Objetivos

As reações envolvidas no processo de gaseificação são bastante diversificadas, sendo elas homogêneas, heterogêneas, endotérmicas e exotérmicas. No reator, a fluidodinâmica ocorre em sistema multifásico e as cinéticas das reações estão diretamente relacionadas a esse comportamento. Os fenômenos relacionados ao transporte de massa e calor também são complexos. Assim, com essa grande quantidade de equações e uma grande diversidade de fenômenos envolvidos no processo, torna-se correspondentemente complexo o desenvolvimento de metodologias voltadas à modelagem e a simulação deste sistema.

Dessa forma, muitas suposições e idealizações devem ser feitas para se desenvolver um modelo que satisfaça todo o sistema. O programa CSFMB (Souza-Santos, 1987) foi desenvolvido como um simulador de processos, envolvendo reações de combustão e gaseificação em leitos fluidizados e, posteriormente, foi aprimorado e registrado em 2008 como CeSFaMBTM. O programa está basicamente estruturado em correlações semiempíricas e nos balanços materiais e de energia.

Neste trabalho, apresenta-se uma metodologia com o objetivo de investigar a qualidade final do gás obtido no processo de gaseificação de uma unidade piloto em leito fluidizado. A gaseificação ocorre em reator de leito fluidizado que opera a pressão ambiente e temperatura em torno de 900°C. Para tanto, foram realizadas simulações no CeSFaMB[™] baseadas em um planejamento experimental fatorial visando à análise estatística de fatores independentes. A análise dos resultados foi realizada com o auxílio do *software* Statistica, versão10.

1.3 Estrutura do Trabalho

A presente monografia está estruturada como segue.

- No Capítulo 2 é feita uma breve revisão bibliográfica do processo de gaseificação;
- No Capítulo 3 é apresentada a Metodologia do trabalho, destacando o simulador utilizado e as simulações desenvolvidas, além do planejamento experimental desenvolvido;
- No Capitulo 4, são apresentados os resultados e discussões.
- No Capitulo 5, por fim, as conclusões do trabalho são elaboradas.

2 Revisão Bibliográfica

2.1 Introdução à Gaseificação

A gaseificação é definida como um processo endotérmico de conversão de um combustível sólido ou liquido, em um gás de média ou baixa capacidade calorífica, por meio da oxidação parcial a temperaturas elevadas, realizado por um agente gaseificador. No processo podem-se usar diversos combustíveis entre os renováveis, como a biomassa, e os não-renováveis, como o carvão.

O uso de fontes renováveis no processo é extremamente vantajoso, uma vez que, no caso da biomassa, a liberação de CO_2 , oriundo do carbono que a mesma acumulou durante o seu desenvolvimento, formará um ciclo fechado, que resulta num saldo nulo de emissões. Tendo em vista uma análise química do processo, este é bastante complexo, pois envolve muitas reações que ocorrem simultaneamente, como a pirólise, a combustão e gaseificação (Andrade, 2007).

O processo é realizado em equipamentos denominados gaseificadores e pode ser empregado para a produção de gás de síntese, usado na produção de combustíveis através do processo *Fischer-tropsch*; na obtenção de hidrogênio; além da produção de outros produtos químicos com maior valor agregado. Segundo Andrade, 2007, o gás de síntese pode ser utilizado em outras formas de produção de energia e entre elas encontram-se a Gaseificação Integrada com Ciclo Combinado (IGCC - "Integrated Gasification Combined Cycle"), a gaseificação e motores de combustão interna alternativos, gaseificação e turbina a gás (Biomass Integrated Gasification/ Gás Turbine - BIG/GT).

O produto deste processo é composto principalmente por hidrogênio gasoso (H_2) , monóxido carbono (CO), dióxido de carbono (CO₂) e metano (CH₄). Além destes, porém em menores quantidades podem ser obtidos traços de alguns hidrocarbonetos mais pesados como o etano e o etileno, e dependendo do agente gaseificador, pode se obter também gás nitrogênio (N₂) e vapor d´agua (H₂O). Como subprodutos deste processo, podem ser obtidos contaminantes que variam de acordo com a biomassa

utilizada. Além destes em maiores quantidades, são obtidos alcatrão e um resíduo sólido de carbono não convertido denominado char (Souza-Santos, 2010).

A importância do processo de gaseificação é histórica e segue desde a 2ª Guerra quando ouve uma escassez energética e uma extrema dificuldade, principalmente por parte dos alemães em importar petróleo. Porém uma dificuldade surge nos tempos atuais em relação ao processo e um imenso desafio será projetá-lo e otimizá-lo de modo a atender às exigências de qualidade para suas possíveis aplicações (Siedlecki, Simeone, Jong, & Verkooijen, 2007) . Entre os principais desafios podemos citar: a dificuldade de fazer o escalonamento para unidades industriais e a instabilidade no processo de produção do gás (Chen, Andries, Spliethoff, Fang, & Enden, 2004).

A composição do gás gerado pode ser afetada por uma série de fatores, os quais se podem citar as características da biomassa envolvida no processo, as condições do gaseificador como temperatura e pressão, a energia envolvida no processo, o agente gaseificador, o tipo de reator, dentre outros. Ao se tratar de reatores de leito fluidizado, a dinâmica de fluidização é um fator importante também ao processo.

2.2 Etapas do Processo

Geralmente o processo de gaseificação, que é conduzido no interior de um gaseificador utilizando um combustível genérico, ocorre em quatro etapas distintas a diferentes temperaturas: secagem, enquanto se aquece o combustível (temperaturas maiores que 150°C); pirólise ou devolatilização (temperaturas entre 200°C e 700°C); combustão dos voláteis e do carbonizado (única etapa exotérmica com temperaturas entre 700°C e 1500°C) e reações de gaseificação (temperaturas entre 800° e 1100°C).

a) Secagem

No processo de secagem a umidade é removida assim que a matéria prima é alimentada ao reator, devido às altas temperaturas no interior do equipamento. O valor da umidade dos sólidos alimentados dentro do gaseificador varia dependendo da natureza do material, no entanto, pode chegar até 90% em massa (Basu, 2006). O calor latente de vaporização da água é 2260 kJ/kg, valor alto de energia que não é recuperado. Assim sendo, a umidade inicial da matéria prima torna-se um parâmetro fundamental

para avaliar a viabilidade econômica do processo comparada à demanda energética nessa primeira etapa.

A umidade contida na matéria prima pode ser classificada como sendo umidade livre ou externa e umidade inerente ou de equilíbrio (Basu, 2010). A umidade inerente está dentro da estrutura do sólido e a umidade livre está na superfície. Enquanto a primeira não pode ser retirada previamente à gaseificação, a segunda pode perfeitamente ser eliminada com um processo de pré-secagem e assim, a etapa é complementada dentro do equipamento utilizando o calor fornecido ao sistema (Castellanos, 2012).

b) Pirólise

Nesta etapa irá ocorrer a decomposição química da matéria prima, com auxilio do calor na ausência de oxigênio, em gases condensáveis e não condensáveis, além de sólidos. O composto sólido produzido no processo de pirólise é composto principalmente por oxigênio, hidrogênio e contaminantes. Os gases condensáveis são o vapor d'água, o óleo, a nafta e alcatrão. Este último tem grande importância no processo, pois possui uma alta viscosidade devido a sua constituição por uma mistura de hidrocarbonetos aromáticos, poliaromáticos e condensáveis. Devido a essa característica, o mesmo pode causar sérios danos ao equipamento e diminuir a aplicabilidade do gás final do produto. Assim sendo, é de suma importância eliminar ou minimizar a quantidade de alcatrão produzida dentro do gaseificador (Basu, 2006).

c) Combustão

Nesta etapa do processo, o conteúdo carbonáceo presente na matéria prima entra em contato com o oxigênio a altas temperaturas e assim ocorre uma série de reações. Assim, será queimado o gás de síntese, os demais produtos da gaseificação podendo ser sólido ou líquido ou mesmo o combustível primário. As reações de gaseificação em geral são endotérmicas e, portanto, o calor necessário para que esses processos ocorram é gerado através de reações exotérmicas no interior do reator, como reações de oxidação ou reações de combustão de material carbonizado (Souza-Santos, 2010).

A reação de combustão completa do material carbonizado libera uma quantidade maior de energia, enquanto a reação de combustão parcial com oxigênio libera somente 28% da energia comparada com a combustão completa, mas produz o gás combustível CO (Castellanos, 2012). A reação de combustão parcial ocorre mais lentamente que a reação de combustão completa. O que irá determinar a taxa com que cada uma destas ocorra é a temperatura dos reagentes e para tanto, existe um coeficiente de distribuição de reação que é capaz de representar a reação de combustão geral de acordo com a equação:

$$\beta C + O_2 \rightarrow 2(\beta - 1)CO + (2 - \beta)CO_2 \tag{1}$$

Segundo (Basu, 2010) e (Souza-Santos, 2004), o coeficiente β pode ser calculado através da seguinte equação:

$$\beta = \frac{[CO]}{[CO_2]} = 2400 * e^{-(\frac{6234}{T})}$$
(2)

onde o valor T se refere à temperatura dos reagentes.

Em temperaturas altas, como as encontradas ao longo do processo de gaseificação, a concentração do CO é maior que a do CO₂. Assim, Souza Santos (2004) propõe uma alternativa para a estequiometria desta reação: considerar que a combustão de carbonizado só produz CO, e incluir a reação de oxidação de CO, junto com o cálculo do equilíbrio para a estimativa da taxa de reação (Castellanos, 2012).

Uma menção importante deve ser feita a respeito da modelagem do material carbonáceo. Considerar que este possui apenas carbono é apenas uma simplificação, uma vez que neste estão presentes outros elementos também, porém em pequenas quantidades como o nitrogênio, hidrogênio e oxigênio e impurezas.

d) Gaseificação

No processo de gaseificação são diversas as reações que ocorrem com o combustível sólido sendo elas totais ou parciais. Estas ocorrem entrem o material carbonizado oriundo da pirólise e os gases presentes no interior do gaseificador, com exceção do oxigênio. Abaixo serão listadas as principais reações que ocorrem no interior do reator com os respectivos nomes e calores de reação (Gómez-Barea & Leckner, 2010). Uma pequena, porém importante observação deve se frisar a respeito dos sinais dos valores, estes implicam a condição exotérmica ou endotérmica da reação.

1-	$CO + \frac{1}{2}O_2 \iff CO_2$	-283 kJ/mol	Oxidação do Monóxido de Carbono
2-	$H_2 + \frac{1}{2}O_2 \iff H_2O$	-242 kJ/mol	Oxidação do Hidrogênio
3-	$CH_4 + 2O_2 \leftrightarrow CO_2 + 2H_2O$	-803 kJ/mol	Oxidação do Metano
4- ($CO + H_2O \iff CO_2 + H_2$	-41 kJ/mol	Deslocamento da Água
	Reações Heterogêneas		
*	Gaseificação de carbonizado		
5-	$C + CO_2 \leftrightarrow 2CO$	+173 kJ/mol	Reação de Boudouard
6-	$C + H_2 O \iff CO + H_2$	+131 kJ/mol	Gaseificação com vapor
7-	$C + 2H_2 \leftrightarrow CH_4$	-75 kJ/mol	Hidro-gaseificação
*	Combustão do carbonizado		
8-	$C + O_2 \leftrightarrow CO_2$	-394 kJ/mol	Combustão total do carbonizado
9-	$C + \frac{1}{2}O_2 \leftrightarrow CO$	-111 kJ/mol	Combustão parcial do carbonizado

Reações Homogêneas

A reação de número 4 é de extrema importância no processo uma vez que esta aumenta o hidrogênio molecular nos gases produzidos. Ao se comparar as taxas entre as reações de gaseificação do material carbonizado, nota-se que estas dependem da sua reatividade e do potencial de reação do agente gaseificador. A menor taxa entre elas é a reação de gaseificação com hidrogênio. Já a reação de combustão parcial com oxigênio é a que se processa com maior taxa.

2.3 A influência da biomassa no processo

Uma prévia análise das características da biomassa deve ser feita com o objetivo de um desempenho significativo do gaseificador. Dois tipos de análises podem ser feitas

antes de se alimentar o reator: a Análise Imediata e a Análise Elementar. Na análise imediata são determinados os teores de constituintes voláteis, umidade, cinzas e carbono fixo. Na Análise Elementar é determinada a composição dos elementos químicos presentes na biomassa. Segue abaixo a forma com que tais propriedades são avaliadas e o efeito das mesmas (Souza-Santos, 2010).

- a) Cinzas: As cinzas podem ser um grave problema na operação do gaseificador. No interior do reator podem ocorrer problemas de aglomeração e incrustação devido à presença das cinzas, podendo assim até inviabilizar o funcionamento ótimo do equipamento.
- b) Constituintes Voláteis: Um dos problemas no processo de gaseificação é a formação do resíduo sólido de carbono. Assim para evitar a formação deste é necessário um material mais reativo que seja convertido em gás mais facilmente. O grande teor de constituintes voláteis no material torna-o mais reativo.
- c) Umidade: Os problemas causados pelos altos teores de umidade (acima de 30%) podem afetar a qualidade do gás produzido. Assim é de extrema importância que, antes da gaseificação/combustão, se faça a evaporação desta para que não ocorra dificuldade na ignição e uma possível diminuição do poder calorífico do gás gerado.
- d) Poder calorífico: Com a formação de água durante a combustão da matéria prima, provocada pela presença de hidrogênio, o poder calorífico torna-se um parâmetro de extrema importância ao processo. Este expressa a quantidade de energia por unidade de massa (ou volume para gases) liberada na oxidação de um determinado combustível. Existem duas formas de expressar esta propriedade:
- Poder Calorífico Superior: Equivale à soma das energias liberadas na forma de calor e na correspondente gasta na vaporização da água que irá se formar na reação de oxidação. Para determiná-lo, é necessário resfriar todos os produtos da oxidação até a sua temperatura inicial, antes da reação, para que todo vapor produzido se condense.
- Poder Calorífico Inferior: Equivale somente ao primeiro termo, ou seja, é descontada a energia gasta na vaporização da água formada na oxidação.

2.4 Tipos de Agentes Gaseificadores

Para que se procedam perfeitamente todas as reações dentro do gaseificador, é necessário um agente gaseificador. Este é um constituinte presente no processo que deve ser colocado em contato com o combustível sólido. O valor do poder calorífico do gás de síntese produzido no processo de gaseificação depende da quantidade e do tipo de agente gaseificador utilizado (Castellanos, 2012).

Durante o processo, podem ser usados alguns agentes gaseificadores específicos ou a combinação deles. Exemplos que podem ser citados são o vapor d'água, o ar e o oxigênio puro. A tabela 1 contêm os respectivos valores de faixa de poder calorifico para o gás obtido ao se usar tais agentes e a seguir uma explicação da diferença no uso dos respectivos:

Agente	Poder calorífico do gás gerado
Gaseificante	(MJ/Nm³)
Oxigênio Puro	12-28
Ar	4-7
Vapor d´água	10-18

Tabela 1: Poder calorífico dos diferentes agentes gaseificadores. (Castellanos, 2012)

a) Oxigênio Puro

O processo mais usado para se obter oxigênio puro é a destilação criogênica. Esse processo requer alto custo e assim o uso do O_2 como agente gaseificador acaba tornando o processo mais caro ainda. O gás produzido tem médio poder calorífico, ficando em torno de 15 MJ/Nm³ (McKendry, 2002). Ao usar oxigênio puro e/ou ar na gaseificação, há um valor representado por uma razão que se faz bastante pertinente ao processo. Esse valor representa a razão entre a quantidade real de oxigênio fornecido ao sistema e a quantidade estequiométrica necessária para que ocorra a combustão completa do combustível. Ao utilizar valores muito baixos (< 0,2), podem ocorrer graves problemas dentro do gaseificador, como formação excessiva de resíduo sólido de carbono e baixo poder calorífico do gás produzido, além de uma combustão incompleta. Por outro lado, valores muito altos (> 0,4) resultam na formação excessiva de produtos da combustão (como CO₂ e H₂O), diminuindo também o poder calorífico do gás (Basu, 2006).

b) Ar

O uso do ar como agente responsável pela gaseificação apresenta uma vantagem em relação aos demais relacionada ao custo; este demanda menor custo. O processo é mais simples, desenvolvido comercialmente e amplamente utilizado, principalmente em processos industriais e na operação de motores. Todavia, ao usar o ar como agente, observa-se uma desvantagem relacionada ao poder calorífico. Como o gás utilizado está diluído em uma grande quantidade de nitrogênio, o poder calorífico obtido para o gás final será baixo, numa faixa de 4 a 6 MJ/Nm³.

c) Vapor d'água

Ao utilizar o vapor como agente gaseificante, se tem um tipo de gaseificação indireta. Para se obter o calor necessário para que as reações endotérmicas ocorram, é necessária uma fonte de calor externa ao gaseificador.

Existem três tipos de fontes de calor ao utilizar o vapor d'água numa gaseificação indireta. O primeiro tipo é uma fonte externa, como por exemplo, a energia solar. Segundo Gómez-Barea & Leckner (2010), esta não é ainda uma fonte comercialmente atraente devido às limitações econômicas na fabricação de equipamentos.

O segundo, o calor é obtido pela recirculação de parte do gás combustível gerado no processo. No leito do gaseificador, ocorrerá uma recirculação dos produtos da combustão com alta temperatura. E no terceiro tipo, há a presença de dois reatores em separado onde ocorrerá recirculação de material carbonizado.

No primeiro reator, ocorre a gaseificação do combustível sólido, e o segundo tem o objetivo de queimar o carbono residual e prover todo o calor necessário para desenvolver o processo. Este tipo de gaseificador com dois reatores existe comercialmente e tem apresentado desempenho satisfatório.

2.5 Principais Equipamentos

No processo de gaseificação, os equipamentos normalmente são classificados de acordo com o tipo de leito. Os principais reatores utilizados na gaseificação da biomassa estão listados a seguir:

2.5.1 Leito Fixo

Os gaseificadores de leito fixo são os mais antigos e os mais difundidos no mercado. Comparados aos gaseificadores de leito fluidizado, apresentam características relativamente simples e apresentam três tipos de equipamento relacionado ao tipo de escoamento, com características específicas associadas ao seu funcionamento.

a) Gaseificador Contracorrente ("updraft"):

Neste tipo de gaseificador, a biomassa e o agente gaseificador são alimentados em locais distintos. A biomassa é alimentada no topo e então segue num fluxo contracorrente em relação ao agente, que por sua vez é alimentado na seção inferior do reator. O ar, ao entrar em contato com a biomassa numa região de alta temperatura, provoca sua combustão. A seguir, os gases provenientes da reação, sobem para uma região de baixa temperatura e ocorre redução de CO_2 e H₂O à CO, H₂ e CH₄. Nessa região de baixa temperatura, os gases encontram a biomassa em fluxo descendente, nas etapas de pirólise e secagem.

Esse tipo de reator produz um gás com alto teor de alcatrão e óleos formados na pirólise, sendo necessária uma lavagem dos gases em etapa posterior à gaseificação, provocando uma perda de calor sensível e diminuindo a eficiência energética global do processo (Nemer, 2010). O alcatrão produzido na zona de pirólise não será craqueado na zona de combustão e assim será gerado um gás extremamente impuro.

Como vantagens no uso de gaseificadores de leito fixo com fluxo contracorrente, tem-se: construção simples e robusta, baixa temperatura dos gases de saída, alta eficiência térmica e em conversão de carbono, pouco arraste de cinzas, alto tempo de residência dos sólidos, produz gás adequado para queima direta, desligamento fácil e excelente eficiência de conversão. Como desvantagens: o gás obtido é muito sujo e contém alto teor de alcatrão e devido ao fato de o gás produzido ser muito sujo, não se adequa ao uso em motores de combustão interna, pois necessita de um sistema de limpeza de alto custo.



Figura 3: Esquema simplificado de um Gaseificador de Leito Fixo Contracorrente. (Nemer, 2010).

b) Gaseificador Concorrente ("downdraft")

Este tipo de equipamento já foi amplamente difundido, inclusive utilizado em motores de veículos. Suas características relacionadas ao arranjo e funcionamento permitem um gás relativamente livre de alcatrão. Neste, a biomassa é alimentada no topo e o ar também é alimentado em uma seção superior do reator. O produto gerado segue para uma parte inferior do reator, podendo assim o gás produzido passar por regiões de alta temperatura onde há possibilidade de craqueamento de óleos e alcatrão a gases simples ou carbono.

As diferentes zonas nestes tipos de reatores são bem distinguidas. A biomassa passa pela região de secagem, seguindo para a região de pirólise, posteriormente é encaminhada a região de combustão e por fim chega à zona de redução.

Como vantagens deste tipo de reator podem-se citar: possui uma construção relativamente simples e segura, gás produzido relativamente limpo, alto potencial para conversão de carbono, pouco arraste de cinzas e alta eficiência de conversão. Como desvantagens: requer baixa umidade do combustível que será utilizado, restrição da granulometria do material a ser utilizado como combustível (não pode ser muito pequeno), alta temperatura do gás produzido (saída) e possibilidade de fusão das cinzas devido às altas temperaturas de operação.



Figura 4: Esquema simplificado de um Gaseificador de Leito Fixo Concorrente. (Nemer, 2010).

c) Gaseificador de fluxo cruzado

As características fornecidas por este tipo de equipamento possuem características intermediárias em relação aos dois anteriores. Apresenta uma rápida resposta à variação de carga, a taxa de fornecimento de ar necessária para esse equipamento é maior em relação aos demais e é simples a sua construção. Ocorre que na utilização deste tipo de equipamento há uma restrição por parte da biomassa a ser utilizada; este possui uma sensibilidade em relação à umidade e a granulometria.

Em algumas pesquisas feitas utilizando este tipo de equipamento, mostrou-se que este é eficiente ao se utilizar carvão vegetal. Porém em outros testes, o mesmo obteve bons resultados operacionais, utilizando-se lenha e uma mistura de lenha e serragem.

2.5.2 Leito Fluidizado

Nos equipamentos de leito fluidizado há um excelente contato entre gás e sólido, e este promove uma circulação vigorosa das partículas envolvidas no processo. Para este tipo de reator, este contato entre o gás e o solido favorece as reações que envolvem o processo, além de provocarem uma uniformidade na temperatura do leito.

No gaseificador de leito fluidizado, é utilizado areia como leito, sendo que esta será aquecida e mantida em suspensão por um fluido, que pode ser o ar. A biomassa é introduzida no leito sendo queimada assim que entra em contato com as partículas que o constitui (Nemer, 2010). Para ter um ótimo desempenho, este tipo de equipamento depende de alguns parâmetros tais os quais se podem citar: características da biomassa; parâmetros relacionados à operação do reator como temperatura do leito, velocidade superficial, carga da biomassa e pressão do reator; além do agente oxidante.

Este tipo de equipamento pode ser dividido em duas classes: os do tipo borbulhante e os do tipo circulante. Para o gaseificador em leito fluidizado borbulhante ocorre um arraste de partículas devido ao processo e estas não são reenviadas ao leito, que opera a velocidades abaixo que a de arraste pneumático. A alimentação de biomassa ocorre diretamente na zona do leito. Nos gaseificadores em leito fluidizado circulante ocorre uma diferença. Neste as partículas arrastadas durante o processo são reenviadas ao leito, operam próximo do arraste pneumático e, devido ao tempo de residência das partículas ser maior, ocorre uma maior conversão de carbono.

Existem algumas vantagens que podem ser citadas a respeito dos gaseificadores em leito fluidizado: permite tolerância a variações na qualidade do combustível, faixa variada de granulometria, em relação à temperatura do leito apresenta um bom controle, rápida resposta em relação à carga, ótima distribuição de temperatura do leito, pode ocorrer processo catalítico no leito, níveis de alcatrão no gás produzido são moderados, possibilidade de operação sob carga parcial e alta eficiência de conversão. Como desvantagens: sistema de alimentação, possibilidade de aglomeração do leito, não é trivial sua operação e para dar sua partida demanda certo tempo.



Figura 5: Os dois tipos de Gaseificador em leito fluidizado. (Nemer, 2010).

2.6 Fluidização

Na fluidização ocorre uma circulação de partículas juntamente com um fluido, que pode ser liquido ou gás, e esta impede a existência de gradientes de temperatura, de pontos muito ativos e de regiões estagnadas no leito, além de proporcionar um maior contato superficial entre solido e fluido. A eficiência no uso de um leito fluidizado irá depender de alguns parâmetros (Souza-Santos, 2010) e alguns destes serão apresentados a seguir.

a) Velocidade

Este é um dos parâmetros fundamentais para se determinar se o leito atingiu ou não as condições mínimas de fluidização. Em baixas velocidades, o fluido em questão passa através dos espaços entre as partículas, porem não possui uma força de arraste suficiente para se sobrepor a força da gravidade e fazer com que as partículas se movimentem. Com um pequeno aumento da velocidade, as partículas se afastam umas das outras, ocorrem ligeiras vibrações no leito e assim é obtido um leito expandido. Aumentando ainda mais a velocidade do fluido, a soma das forças de empuxo causada pelo escoamento do fluido se iguala as forças causadas pelo peso das partículas presentes no leito. Neste momento é obtida a velocidade mínima de fluidização que é a necessária para fluidizar o leito de partículas. Em velocidades acima desta, observam as condições de fluidização borbulhante, turbulenta e rápida. Para velocidades muito altas, ocorre transporte pneumático das partículas. Na Figura 7 é possível observar as distintas fases da fluidização desde as velocidades mais baixas até o arraste das partículas.

b) Tamanho das partículas

As partículas usadas em reatores com leito fluidizado podem variar no seu tamanho e densidade. Como a forma das partículas também é diferente em uma mesma amostra, não se podem extrapolar resultados obtidos em um experimento para outros em condições distintas. Com o objetivo de fazer possíveis generalizações e minimizar os erros, Geldart, 1973 classificou o comportamento de sólidos fluidizados por gases em quatro categorias: A, B, C e D. As partículas do tipo A, são pós finos e leves que apresentam tamanho médio e baixa densidade, abaixo de 1,3 mg/cm³. As partículas do grupo B já são um pouco maiores. Possuem diâmetro entre 40 e 500µm e densidade superior a 1,4 g/cm³, sendo a areia do mar e de rios bons exemplos. As partículas do grupo C são pós finos altamente coesivos e possuem dificuldade em fluidizar ou não proporcionam uma fluidização eficaz. Já as partículas do grupo D são grandes e possuem densidade elevada.



Figura 6: Diferentes estados das partículas durante a fluidização. (Castellanos, 2012).

c) Porosidade

A porosidade é definida pela capacidade de partículas de armazenar fluidos em seus espaços. Estes podem ser preenchidos por um fluido seja ele gás ou líquido. Esta propriedade é expressa em porcentagem e pode ser obtida através da razão entre o volume de espaço livre entre as partículas e o volume do leito. Junto com a velocidade, constituem um dos principais parâmetros no estudo da fluidização de sólidos e, por conseguinte, na modelagem do seu comportamento hidrodinâmico.

d) Esfericidade

Devido às diferentes formas em que se podem encontrar as partículas, se faz necessário o uso de um conceito de uma propriedade também bastante importante na fluidização. Quando uma partícula não é esférica, um parâmetro importante a se conhecer é o diâmetro da mesma. Através deste poderá se quantificar a diferença entre uma forma real de uma partícula e a forma de uma esfera. A esfericidade pode ser obtida através da razão entre a área superficial de uma esfera e a área superficial da partícula, considerando que as duas têm o mesmo volume.

e) Queda de Pressão

No processo de fluidização, a queda de pressão é uma variável também muito importante e esta diretamente associada à velocidade do gás na alimentação do reator. A variação do ΔP com a velocidade podem ser observadas através do gráfico presente na Figura 7. Neste é possível observar pontos e regiões distintas cada qual com uma importância distinta no fenômeno.



Figura 7: Gráfico ΔP x Velocidade em diferentes regimes de fluidização. Adaptada de (Castellanos, 2012).

O ΔP vai aumentando gradativamente à medida que é aumentada a velocidade até certo momento onde essa queda de pressão se iguala à força gravitacional exercida pelo leito de partículas (linha OA). No ponto A as partículas começam a se mover e ocorre um pequeno aumento do ΔP até o ponto B. Nesse ponto, ocorre que para qualquer acréscimo de velocidade ao sistema, as partículas se separam e ocorre a fluidização. Após a ocorrência do fenômeno, a queda de pressão diminui um pouco até o ponto C e as partículas passam a se mover de forma randômica dentro do leito. A partir desse ponto, qualquer aumento de velocidade ao sistema não afetará a queda de pressão do sistema e o espaço entre as partículas que constituem o leito aumenta ainda mais. No ponto D, a porosidade se aproxima do valor unitário e com qualquer aumento da velocidade, fará com que a pressão diminua até certo ponto, onde ocorrerá arraste das partículas.

2.5 Cinética

A gaseificação é um processo termoquímico onde espécies químicas reagem através de diversas reações simultâneas e por fim é gerado um produto com certo valor agregado. Nestas múltiplas transformações que ocorrem no processo, há taxas reacionais para as distintas reações e há dois parâmetros que devem ser abordados com certa cautela.

No processo global, a temperatura é um parâmetro de extrema importância. As taxas reacionais estão diretamente relacionadas com a temperatura na modelagem das equações e esta pode ser um fator que irá proporcionar mudanças nas estruturas do combustível sólido assim como também na sua composição. Como já foram mencionadas anteriormente, além dessas transformações, as distintas etapas do processo de gaseificação ocorrem em intervalos de temperaturas distintos e em alguns casos, grandes e baixos intervalos podem favorecer ou desfavorecer uma reação.

O outro parâmetro que também é de vital importância na cinética do processo de gaseificação é a estequiometria. Algumas espécies químicas como oxigênio, carbono e hidrogênio estão presentes em todas as reações e a partir destes é que se formarão os produtos principais, como o gás de síntese. Outras espécies também estão presentes, principalmente na constituição da biomassa, porém em quantidades menores, como o enxofre e o nitrogênio. Assim é necessário obter uma análise de todos esses constituintes, principais e coadjuvantes, para poder quantificar os produtos principais e resíduos que serão obtidos no processo.

Como foi mencionado na seção 2.3, um combustível sólido é caracterizado através das análises imediata e elementar. O processo para se determinar a análise imediata é mais simples e econômica que a analise elementar (Castellanos, 2012). Na análise elementar é possível encontrar as frações mássicas dos principais constituintes do combustível sólido, além da quantidade de cinzas e de umidade.

As quantidades de hidrogênio e oxigênio presentes no material sólido independem da quantidade dos mesmos elementos presentes na umidade. Os elementos presentes no combustível sólido são oxigênio, hidrogênio, nitrogênio, enxofre e carbono. As frações mássicas destes elementos representadas por w_0 , w_H , w_N , w_S e w_C , respectivamente, somadas às frações de cinzas (w_A) e umidade (w_M) equivalem a 100% dos constituintes do combustível.

A determinação das frações mássicas da análise elementar é importante para o cálculo de uma quantidade teórica de agente oxidante para realizar a combustão completa do combustível. A oxidação completa do combustível sólido e a reação que especifica o processo de gaseificação, assim como a estequiometria, estão representadas pela seguinte forma:

$$CH_{aH}O_{aO}N_{aN}S_{aS} + \left(1 + \frac{a_H}{4} - \frac{a_O}{2} + \frac{a_N}{2} + a_S\right)O_2 \to CO_2 + \frac{a_H}{2}H_2O + a_NNO + a_SSO_2$$
(3)

O carbono é tomado como elemento base para a representação do restante dos coeficientes. Os coeficientes a_i representam cada outro elemento químico presente no combustível. Assim para definir tais coeficientes dos demais elementos, é necessário a fração (w_c) e o peso molar do carbono (M_c) , além da fração (w_i) e peso molar (M_i) do respectivo elemento. A equação para o cálculo de tal coeficiente pode ser representado pela seguinte equação:

$$a_i = \frac{w_i M_C}{w_C M_i} \tag{4}$$

No processo, um dos agentes gaseificantes mais usados é o ar. Para obter uma oxidação completa do combustível, é necessária uma razão ar/combustível teórica, que pode ser calculada através da seguinte equação:

$$F_{ar-est} = \frac{\left(1 + \frac{a_H}{4} - \frac{a_O}{2} + \frac{a_N}{2} + a_S\right)}{1} * \frac{100}{X} * \frac{M_{ar}}{M_{comb}}$$
(5)

Na equação, M_{ar} e M_{comb} representam respectivamente as massas de ar e de combustível. A variável X equivale à quantidade em porcentagem de oxigênio presente no ar, sendo que esta normalmente equivale a 21%. A massa de ar, considerando este, constituído único e exclusivamente por oxigênio e nitrogênio, pode ser calculada por:

$$M_{ar} = \frac{X}{100} * 2 * M_0 + \left(\frac{1-X}{100}\right) * 2 * M_N \tag{6}$$

$$M_{combustivel} = \sum a_i M_i \tag{7}$$

As variáveis $M_o e M_N$ representam respectivamente as massas de oxigênio e nitrogênio para o calculo da massa de ar necessário.

Após as definições anteriores e equações, é possível definir um parâmetro denominado razão estequiométrica, que possui grande importância na cinética do processo de gaseificação. Este pode ser obtido através da seguinte equação.

$$RE = \frac{F_{ar-real}}{F_{ar-est}} \tag{8}$$

Em seu trabalho desenvolvido sobre gaseificação de bagaço de cana-de-açúcar, Villamil Castellanos, 2012 reporta que os valores para a razão estequiométrica no processo de gaseificação podem variar de 20 a 35%.

No mercado, existe apenas um simulador capaz de representar em forma bem detalhada e minuciosa o processo de gaseificação utilizando o bagaço de cana-de-açúcar e este é o CeSFaMB[™]. Assim sendo, algumas restrições e dificuldades para se atingir convergência numérica foram observadas durante os experimentos. No trabalho de Arakaki, (2013), também foi encontrado o mesmo tipo de problema. Neste trabalho, devido esses problemas de convergência, foi usado em quatro simulações, razão estequiométrica igual a 40%.

3 Metodologia

3.1 Modelagem

A modelagem de um gaseificador em leito fluidizado envolve uma descrição extremamente complexa, baseada em balanços de massa e energia, transferência de massa e calor, reações químicas diversas com suas respectivas taxas reacionais, além de outros fenômenos. Muitos autores afirmam que a termodinâmica e a cinética de todo o processo é algo bastante difícil de prever, o equacionamento e uma boa modelagem deste pode ajudar a otimizar o projeto e a operação dos gaseificadores de biomassa.

Muitos trabalhos têm sido desenvolvidos utilizando o carvão na alimentação. Porém como destacam Nemtsov & Zabaniotou (2008) alguns constituintes da biomassa como a lignina, celulose e hemicelulose possuem seu próprio comportamento térmico, o que dificulta ainda mais a modelagem da gaseificação.

Um modelo matemático para a simulação de um processo de gaseificação em leito fluidizado borbulhante foi proposto por Hamel & Krumm (2001). No trabalho, os autores levam em consideração para o desenvolvimento do modelo, a cinética química das reações, a dinâmica no leito e no *freeboard*, a secagem do combustível a devolatilização. Os equipamentos foram operados variando uma ampla gama de parâmetros. Como agentes gaseificadores foram usados ar, ar/vapor d´água e O₂/vapor. Foram testados distintos combustíveis também como carvão, turfa e serragem; além de diferentes razões estequiométricas.

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.

Já de Castro, Cassiano & Ferreira (2009) utilizaram o software Aspen Plus® na modelagem da gaseificação do bagaço de cana-de-açúcar. No trabalho, os autores realizaram simulações para condições distintas de fluxo de alimentação de biomassa, vapor d'água e ar. Os resultados foram considerados satisfatórios e tiveram como objetivo a otimização do processo.
3.2 Simulações no CeSFaMBTM

Em um de seus trabalhos, Souza-Santos (1987) começou a desenvolver um simulador originalmente com o nome de CSFB, baseado em correlações semiempíricas, relações envolvendo quantidade de movimento, transferência de calor e massa, balanços de massa e energia, e na cinética das reações químicas homogêneas e heterogêneas do processo de gaseificação. Entre as principais simplificações do modelo assumido no CSFB estão: modelo unidimensional, regime estacionário, presença de duas fases no leito, modelo de primeira ordem, e a taxa de circulação das partículas no leito ser suficientemente alta para ter uma composição homogênea das partículas solidas no leito (Castellanos, 2012).

Ao longo dos últimos anos, esse simulador vem sido constantemente modificado com a introdução de novas correlações com o objetivo de obter maior precisão em relação aos fenômenos físicos e químicos que ocorrem dentro do equipamento durante o processo da gaseificação. Atualmente, denomina-se CeSFaMBTM (Comprehensive Simulator of Fluidized and Moving Bed Equipment).

Um importante trabalho foi realizado por Castellanos (2012) utilizando o simulador CeSFaMBTM. Neste trabalho, o autor propõe de forma bastante minuciosa, como são feitos tais balanços materiais e de energia, como são feitas as simplificações na dedução das equações envolvidas e também as respectivas condições de contorno acerca de distintos volumes de controle para a resolução das mesmas.

No presente trabalho, empregou-se o CeSFaMB[™]. A seguir, será apresentada uma descrição do funcionamento do simulador, que é algo complexo. Diversas informações são necessárias assim como muitos dados de entrada, uma abordagem superficial e uma compreensão da geometria do equipamento a ser utilizado, soluções das equações diferenciais inseridas e um entendimento dos resultados gerados a partir dos dados de saída do simulador.

Em simulações de processo de gaseificação em leito fluidizado borbulhante, os dados de entrada podem ser classificados em três segmentos distintos e os quais se podem citar: os parâmetros de convergência numérica, dados de entrada geométricos e físicos do equipamento e a caracterização dos gases e sólidos (Castellanos, 2012).

Para as simulações serem realizadas de forma satisfatória, é necessária uma série de informações para os dados de entrada e a seguir será feita uma breve descrição dos dados geométricos e a caracterização dos gases e sólidos. Os parâmetros de convergência numérica são apresentados no Apêndice A. Uma descrição mais detalhada de todos os parâmetros de entrada envolvidos em simulações no CeSFaMB[™] é obtida através do manual CeSFaMB®/CSFMB© Comprehensive Simulator of Fluidized and Moving Bed Equipment (Souza-Santos, 2013).

3.2.1 Dados geométricos e físicos do equipamento

Os parâmetros físicos e geométricos são de extrema importância nas simulações. Uma boa compreensão de toda geometria do equipamento e de uma grande quantidade de dados físicos, poderão levar o usuário a obter simulações bem próximas à realidade.

A Figura 8 mostra os principais parâmetros geométricos relacionados ao reator de leito fluidizado. Além disso, mostra também, bem definida, a região compreendida pelo *freeboard* ZD < Z < ZF, a região compreendida pelo leito 0 < Z < ZD e o distribuidor, onde está a placa porosa. Além destes parâmetros geométricos, alguns dados físicos referentes ao material que constitui cada uma destas regiões devem ser bem definidos para se obter simulações bem precisas. Essas características físicas como porosidade, emissividade, condutividade térmica, dentre outros, estão relacionadas com alguns fenômenos que ocorrem no interior do reator, como fluidização e transferência de calor.

A Tabela 2 contêm os principais parâmetros, sua localização no reator, nome referente ao dado de entrada, o nome do parâmetro no CeSFaMB[™], as unidades deste parâmetro e o respectivo valor usado em todas as simulações.



Figura 8: Esquema de um reator de leito fluidizado. (Castellanos 2012).

Seção	Dado Referente à Entrada	Nome no CeSFaMB™	Unidade	Valor
Equipamento	Diâmetro interno do equipamento	DIAME(i)	(m)	0.0828 (1) 0.0828 (2) 0.1345 (3) 0.1345 (4)
	Posição z relativa ao diâmetro interno	ZPOSE(i)	(m)	0 (1) 0.585 (2) 0.897 (3) 1.052 (4)
Leito	Altura dinâmica	ZD	(m)	0.585

Tabela 2: Dados utilizados em todas as simulações neste trabalho. (Castellanos, 2012).

	Espessura do casco e	XISD(i)	(m)	0.003048 (1)
	isolamento		(111)	0.137 (2)
	Condutividade térmica no	AKISD(i)	$(W*m^{-1}K^{-1})$	18.7 (1)
	casco e isolamento		(,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,	0.0035 (2)
	Emissividade da superfície externa	EPSD	-	0.9
	Altura principal da saída de gás	ZF	(m)	1.052
	Espessura do casco e	XISF(i)	(m)	0.003004 (1)
Freeboard	isolamento		(III)	0.111 (2)
	Condutividade térmica do	AKISF(i)	$(W*m^{-1}K^{-1})$	18.7 (1)
	casco e isolamento		(,, ,, ,, ,, ,, ,, ,, ,, ,, ,, ,, ,, ,,	0.0035 (2)
	Emissividade da superfície externa	EPSF	-	0.9
	Porosidade da placa distribuidora	EPPP	-	0.3
Distribuidor	Diâmetro médio dos poros na placa	DPOR	(m)	1.5D-4
	Espessura do distribuidor	XISDI(i)	(m)	0.185
	Condutividade térmica	AKISDI(i)	$(W^*m^{-1}K^{-1})$	18.7

3.2.2 Correntes principais

É de extrema importância a caracterização dos gases e dos sólidos que serão utilizados na gaseificação, uma vez que estes compõem as correntes principais do processo. Os agentes gaseificantes, como já foram mencionados neste texto, podem ser o vapor d'água, o ar, oxigênio puro e/ou uma combinação destes. O simulador CeSFaMBTM permite ao usuário a especificação das variáveis que definem os agentes, como temperatura de entrada, pressão, vazão mássica, e porcentagem de cada constituinte. Para este trabalho a temperatura dos gases de entrada foi mantida constante, o que será explicado mais a frente.

A caracterização dos sólidos envolve também algumas outras variáveis relevantes ao processo além da composição, como vazão mássica, temperatura e pressão. Num primeiro grupo de dados relacionados à alimentação de combustível, o

simulador permite ao usuário escolher até cinco tipos distintos de combustível sólido, sendo que neste trabalho, o referente é o bagaço de cana-de-açúcar.

Outros dois parâmetros nesse grupo, também importantes, são o poder calorífico superior do sólido e a posição z do ponto de alimentação dentro do reator. Nos dois grupos seguintes estão os dados referentes às análises imediata e elementar do combustível. No quarto grupo estão os dados referentes às densidades total, aparente e real, respectivamente. No grupo seguinte estão dados relacionados à esfericidade e forma das partículas do combustível. Por fim, no último grupo estão os dados referentes à distribuição de tamanho das partículas.

Além destas duas correntes principais, outras correntes secundárias podem ser definidas no simulador também, como inertes e absorventes. Outros dados importantes estão relacionados às condições ambientes, como temperatura e velocidade do vento, assumidos durante o processo de gaseificação. As Tabelas 3, 4, 5, 6, 7, 8 e 9 apresentam os valores referentes a tais dados.

Alimentação do combustível sólido		
Combustível	Bagaço de cana-de-açúcar	
Poder calorífico superior (HHV)	16.73MJ*kg ⁻¹	
Posição do ponto de alimentação	0.068 m	
Temperatura de Entrada	308 K	

Tabela 3: Dados referentes à alimentação do combustível sólido. (Castellanos, 2012).

Tabela 4: Condições ambientes. (Castellanos, 2012).

Velocidade do vento	$2 \text{ m}^{*}\text{s}^{-1}$
Temperatura	308 K

Componente	%
Umidade	4.26
Voláteis	77.99
Carbono fixo	11.03
Cinzas	6.72

Tabela 5: Análise Imediata. (Castellanos, 2012).

Tabela 6: Análise Elementar. (Castellanos, 2012).

Componente	%
Carbono	47.63
Hidrogênio	6.16
Nitrogênio	0.42
Oxigênio	38.46
Enxofre	0.31
Cinzas	7.02

Tabela 7: Esfericidade e densidade das partículas. (Castellanos, 2012).

		Bagaço de Cana	Material Inerte
Esfericidade	Forma das partículas	Esférica	Esférica
	Esfericidade	0.7	0.98
	Total	720	2000
Densidade (kg*m ⁻³)	Aparente	200	3563
	Real	1394	3564

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 8: Distribuição de tamanho de partícula para o combustível. (Castellanos, 2012).

Tabela 9: Distribuição de tamanho para o material particulado no leito (inerte). (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

3.3 Equipamento

O presente trabalho é desenvolvido em um gaseificador de leito fluidizado borbulhante que pertence a uma planta piloto real.

Os componentes principais da planta são o reator de leito fluidizado borbulhante, sistema de alimentação de agentes gaseificadores, sistema de alimentação de sólidos, ciclones para remoção do material particulado, sistema para tratamento do gás produzido e um sistema de controle.

Outros componentes da planta merecem uma atenção maior, pois mais tarde, poderão afetar, em parte, os resultados das simulações que serão mais bem explicados adiante. O primeiro deles é o sistema de aquecimento externo. Compõem o sistema duas resistências elétricas sendo que uma delas é responsável pelo aquecimento do leito e a outra pelo *freeboard*.

Outro sistema importante é o de alimentação de agentes gaseificadores. Para o vapor d'água, há um sistema de alimentação exclusivo. Este sistema é composto por dois elementos principais: uma bomba e um evaporador. O primeiro componente tem por função alimentar água até o evaporador para a formação de vapor, e o outro componente, tem a função de produzir vapor para alimentar o reator. Este vapor pré-aquecido gerado alcança temperaturas de até 400°C antes de ser alimentado ao sistema.

Já os gases possuem outro sistema de alimentação. A corrente de O_2 é aquecida por um componente denominado *preheater* que aquece o gás antes de ser alimentado ao reator. O sistema possui entrada para nitrogênio, pois este serve para controlar a temperatura no interior do equipamento em casos críticos. Estes, antes de entrarem no reator, são enviados primeiramente a um pré-aquecedor onde atingem temperaturas na faixa de 350-400°C.

Outro sistema importante é o de alimentação para os sólidos. No projeto da planta piloto foram feitas pesquisas utilizando bagaço de cana-de-açúcar e ar, vapor d'água, oxigênio ou uma mistura destes, como agentes gaseificantes.

O sistema de alimentação de biomassa, na forma sólida, é constituído por um funil acoplado a um parafuso sem fim, que gira governado por um motor, sendo que

este conjunto pode ser calibrado a entregar diferentes vazões de sólido, dependendo da sua velocidade de rotação. A máxima vazão de biomassa que pode ser alimentada no interior deste reator é de 1 kg*h⁻¹.

3.4 Dados de Saída (*output*)

Com a conclusão das simulações no CeSFaMB[™], o usuário obtém uma série de resultados, dispostos em gráficos, tabelas, entre outros, que serão úteis em análises diversas, como também em casos de otimização do processo. Através da análise destes gráficos, tabelas e demais, foi possível organizar os principais dados necessários para este trabalho em planilhas de Excel, com o objetivo de avaliar os dados de saída gerados pelo simulador.

3.5 Planejamento experimental

3.5.1 Análise qualitativa das variáveis do processo

No planejamento experimental realizado, há uma série de variáveis que devem ser citadas com o objetivo de fazer uma boa avaliação qualitativa das quais irão influenciar de forma mais branda ou mais intensa no processo. Algumas já foram superficialmente mencionadas anteriormente. É possível assim listar as seguintes variáveis, de acordo com Cruz et. al., 2012:

- Correntes de Entrada
 - Biomassa (Bagaço da cana-de-açúcar)
 - Vazão de sólido;
 - Granulometria;
 - Composição;
 - Teor de umidade;
 - Temperatura;

- Vapor d´água
 - Vazão mássica (QS)
 - Temperatura;
- Gás
 - Composição (ar, O₂ puro, N₂ puro 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 H_2
- Teor de CO
- Teor de CO₂
- Teor de CH₄

Na literatura há diversos registros sobre uma avaliação quantitativa da influência de quais variáveis acima tem maior relevância no processo, porém estes registros apenas apontam como estas variáveis afetam o processo de forma isolada. Por isso um estudo deve ser feito para avaliar como estas variáveis podem afetar levando em consideração a interação de duas ou mais no processo.

As informações disponíveis na literatura mostram que esta grande quantidade de variáveis pode ser reduzida para um determinado caso específico de um problema de avaliação de efeitos. Assim, com a planta piloto já mencionada anteriormente, algumas dessas variáveis são especificadas, como tipo de leito, geometria do equipamento e dimensões. Com a biomassa definida; o bagaço de cana-de-açúcar; o número de variáveis se reduz mais ainda, pois temperatura, granulometria, composição e teor de umidade ficam especificados. Em relação aos agentes responsáveis pela gaseificação, as temperaturas serão mantidas fixas e os gases usados serão vapor d´água e oxigênio puro.

O número de variáveis do processo é reduzido consideravelmente e, portanto, o processo fica apenas com as variáveis das correntes de entrada (vazão de biomassa (QB), a vazão de vapor d'água (QS) e a vazão de gás (QO₂)) e as variáveis do reator (temperatura do *set-point* do leito (Ts) e do *freeboard* (Tf)), como variáveis a serem investigadas. Já as variáveis relacionadas à corrente de saída do processo, são as que terão seus efeitos analisados com as simulações.

Segundo Kumar et. al. (2009) e Wu et. al. (2012), estas variáveis apresentadas acima ainda podem ser agrupadas, gerando razões definidas como razão estequiométrica (RE) já mencionada no capítulo 4 e a razão vapor/biomassa (S/B). As temperaturas relacionadas ao *set-point* do leito e *freeboard* são mantidas fixas e consideradas constantes (Ts = Tf).

Esse tipo de artifício, muito usado em análise de processos, que é reduzir o número de variáveis a serem investigadas, pode ser vantajoso, pois facilita o uso das informações obtidas no laboratório. Porém, ao efetuar este tipo de análise, deve-se ter consciência de que o uso destas transformações pode acarretar em erros, uma vez que os erros das razões são sempre maiores do que aqueles observados para cada uma das variáveis independentes (Coetzer & Keyser, 2003 e Pérez et. al., 2012).

Alguns testes foram realizados no simulador em condições diversas. Simulações foram feitas utilizando aquecimento elétrico. A potência é um dos dados de entrada possível de especificar no simulador. Entretanto não foi obtido êxito nessas simulações, uma vez que o programa não alcançou convergência numérica após longas horas de simulação. Testes foram realizados também usando uma camisa de aquecimento. Entretanto, devido às dificuldades de se estabelecer especificações para as condições do fluído, não se obteve êxito também nessas simulações e o programa não convergiu para um resultado numérico específico.

3.5.2 Análise das variáveis independentes

Tendo em vista que agora temos um plano com quatro variáveis independentes, uma análise mais precisa pode ser feita avaliando os efeitos que cada uma destas pode afetar no processo e assim também como os efeitos combinados. Esta análise ainda pode se resumir a um plano contendo apenas três variáveis, uma vez que podemos assumir um valor constante para uma delas e isso será explicado no decorrer deste capítulo.

Sobre as razões RE e S/B, não é muito aconselhado fazer o uso destas nas simulações, uma vez que quaisquer efeitos que tenham a presença de variáveis suscetíveis a incertezas maiores apresentarão incertezas no mínimo iguais à maior incerteza. Porém o uso destas razões é extremamente importante na avaliação de limites para as variáveis pertencentes ao plano. Esses limites também são propostos tendo uma base em outros experimentos desenvolvidos em operações de gaseificação com bagaço de cana-de-açúcar, conforme reporta Cruz et al. (2013). As faixas estão apresentadas na Tabela 10.

Faixa de Operação
0,2-0,4
0,4 - 1,2
700 - 850

Tabela 10: Plano das variáveis segundo Cruz et al. (2013).

Sobre a temperatura, não é possível inserir no simulador um valor para o setpoint desta. Esse tipo de controle é realizado com aquecimento do reator no leito e no freeboard por um sistema já descrito anteriormente. Para contornar esse obstáculo, diversas simulações com diferentes condições foram testadas e analisadas. A primeira delas foi usar um valor de potência para o sistema de aquecimento elétrico, uma vez que este valor é possível ser inserido no simulador. Entretanto as simulações não obtiveram sucesso, uma vez que não se alcançava convergência. Essa consideração do valor para a potência elétrica constante também fugiria à realidade, porque o aquecimento é controlado a fim de manter a temperatura do leito e do *set-point*.

Outro tipo de simulação foi usar uma camisa de aquecimento, porém esse caso também foi insatisfatório, uma vez que as condições do fluido de aquecimento são de difícil especificação. A alternativa foi adotar a temperatura de entrada dos agentes (TGE) responsáveis pela gaseificação, como uma das variáveis a serem investigadas no processo, sendo que esta será a mesma para o vapor d'água e para o oxigênio. Assim foi possível fornecer o calor necessário ao processo, fazendo o uso desta alternativa.

A variável que merece destaque e que diferencia este trabalho é a vazão de biomassa alimentada ao reator (QB). Os valores para os experimentos devem ser relacionados a uma operação da unidade piloto com 80% da velocidade de rotação do parafuso sem fim. Assim experimentos com 100% e 60% da vazão mássica máxima permitida devem ser analisados, uma vez que estes seriam valores máximo e mínimo, respectivamente, para a alimentação de biomassa ao sistema. Não só a réplica destes pontos e assim como em um ponto central, poderão dar estimativas do erro experimental ao longo dessa faixa.

Após as colocações mencionadas acima, foi possível estabelecer um planejamento experimental para avaliar as variáveis independentes e sua respectiva influência no processo da gaseificação. As variáveis independentes a serem consideradas para análise neste trabalho foram as vazões mássicas de cada corrente de entrada; oxigênio, vapor d'água e biomassa. Para que o plano fatorial não ficasse muito extenso, uma das variáveis, neste caso a temperatura dos gases de entrada, foi mantida constante (TGE=400°C), e a análise desta em conjunto com a as vazões dos agentes responsáveis pela gaseificação já foi desenvolvida em outro trabalho.

Assim o planejamento experimental se resume nas três variáveis independentes, que podem ser obtidas através da Tabela 11, com os valores das razões e com os limites para a vazão de biomassa alimentada ao sistema, já mencionados neste capítulo.

Variável	Faixa de Operação
QS $(kg*h^{-1})$	0.32 - 0.96
$QO_2(kg*h^{-1})$	0.315 - 0.43
$QB(kg*h^{-1})$	0.6 - 1.0

Tabela 11: Planejamento Experimental.

Este planejamento experimental foi desenvolvido em um plano fatorial em três níveis, sendo que as simulações foram realizadas em cada um desses limites para cada uma variável. Além dos limites, foram realizadas também simulações no ponto central das três variáveis e assim foram obtidos $2^3 + 1$ resultados, totalizando nove simulações.

Na planta piloto, há variações nessas variáveis, o que fez com que necessitasse de uma série de outras simulações em torno do ponto central, com o objetivo de simular também as incertezas, repetibilidades operacionais e assim aproximar os resultados cada vez mais à realidade. Essas variações foram obtidas através de incertezas inseridas nos equipamentos utilizados na planta piloto.

Em trabalhos desenvolvidos com unidades de gaseificação, Lenis, Agudelo, & Pérez, 2013, avaliaram a repetibilidade de facilidades envolvidas em unidades de gaseificação. Nestas pesquisas, os autores verificaram que, para a vazão dos gases responsáveis pela gaseificação, usando um sistema de controle de vazão (MFC) similar ao presente na unidade, o valor do erro experimental é cerca de 10% em torno do valor da vazão.

Em relação à corrente de água que é alimentada ao evaporador, a bomba responsável é capaz de operar com precisão de até 1% (Gilson, 2006). Considerando todo o sistema de alimentação de vapor ao sistema, que consiste na bomba e no evaporador, um valor de 5% em torno do valor da vazão de vapor d'água será arbitrado para o erro experimental nesta variável.

A alimentação da biomassa ao sistema é feita pela rotação do parafuso sem fim. Porém neste não há relatos a respeito dos erros experimentais envolvendo esta variável. Assim, será arbitrado como valores para o erro experimental, 15% em torno do valor da variável.

Variável	Ponto Central	Limites do Ponto Central
$QS (kg*h^{-1})$	0.64	0.624 - 0.656
$QO_2(kg*h^{-1})$	0.3725	0.353875 - 0.391125
$QB(kg*h^{-1})$	0.8	0.74 - 0.86

Tabela 12: Limites do plano experimental em torno do ponto central.

Com os valores dos erros experimentais arbitrados para as variáveis, são obtidos mais oito pontos, que são as análises em torno do ponto central. Assim foi realizado um total de dezessete simulações; oito para a faixa de operação normal, o ponto central em relação a esses limites e mais oito simulações em torno do ponto central. Porém para efetivar estas análises é necessário normalizar as variáveis independentes, de forma que estas se encontrem no intervalo [-1,1]. Portanto os limites inferiores terão como valor - 1, os limites superiores terão valor 1 e o ponto central, juntamente com suas incertezas terão como valor 0. A Tabela 13 mostra todas as variáveis independentes, os limites inferior (LI) e superior (LS) para a faixa de operação normal, assim como os limites em torno do ponto central, (LIC) e (LSC), além dos respectivos valores normalizados.

Variável	Limite	Valor (kg*h ⁻¹)	Valor (kg*s ⁻¹)	Valor normalizado
	LI	0.32	8.89*10 ⁻⁵	-1
Vazão de Vapor	LS	0.96	$2.67*10^{-4}$	1
	Ponto Central	0.64	$1.78*10^{-4}$	0
(25)	LIC	0.624	9.83*10 ⁻⁵	0
	LSC	0.656	$1.09*10^{-4}$	0
	LI	0.315	8.75*10 ⁻⁵	-1
Vazão de	LS	0.43	1.19*10 ⁻⁴	1
Oxigênio (OO ₂)	Ponto Central	0.3725	$1.03*10^{-4}$	0
	LIC	0.353875	1.73*10 ⁻⁴	0
	LSC	0.391125	$1.82*10^{-4}$	0
	LI	0,6	$2.78*10^{-4}$	-1
Vazão de	LS	1,0	$1.67*10^{-4}$	1
Vazao de Biomassa (OB)	Ponto Central	0,8	$2.22*10^{-4}$	0
	LIC	0,74	$2.06*10^{-4}$	0
	LSC	0,86	2.39*10 ⁻⁴	0

Tabela 13: Limites da faixa normal e da faixa em torno do ponto central, sendo todos eles normalizados.

3.5.3 Análise das variáveis dependentes

As variáveis dependentes são aquelas que provêm dos dados de saída do processo. As principais estão relacionadas a vazões dos produtos obtidos no processo da gaseificação, além da queda de pressão, que é uma variável que através dela se pode verificar eficácia na operação do equipamento. Com a análise destas variáveis, é possível verificar se o processo foi eficaz, independente da finalidade do processo, sendo na obtenção de gás de síntese, na produção de gás hidrogênio (H₂), entre outros. Os principais produtos de interesse resultantes do processo de gaseificação são:

- Hidrogênio (H₂)
- Monóxido de Carbono (CO)
- Dióxido de carbono (CO₂)
- Água (H₂O)
- Alcatrão

• Queda de Pressão (ΔP)

Para fins de resultados, serão avaliadas as variáveis dependentes relacionadas às quantidades de hidrogênio (H₂), água (H₂O), monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono (CO₂) e a queda de pressão total (Δ P) que é equivalente à soma da perda de carga no leito e na placa. As quantidades de alcatrão obtidas durante todas as simulações foram muitos pequenas e assim não foi feito análise para esta variável. Essas quantidades mencionadas serão avaliadas no seguinte capítulo em base mássica total.

4 Resultados e discussões

Este capítulo é destinado a expor os resultados obtidos através do planejamento experimental proposto, assim como discussões a respeito destes. Além dos resultados exibidos, será apresentada uma análise de sensibilidade para as variáveis dependentes assim como uma avaliação sobre a capacidade do modelo proposto em prever uma relação entre as variáveis independentes com cada variável dependente.

Os resultados obtidos foram provenientes do simulador CeSFaMB[™]. Com o simulador podem ser obtidas diversas informações sobre o resultado final do processo, porém somente serão discutidas aquelas de interesse relevante no presente trabalho. Essas informações são a composição final dos gases obtidos no produto, tanto na forma em que é obtido quanto em base seca, a vazão destes gases em base mássica e base molar, e a perda de carga no processo. Em duas Tabelas presentes no Anexo I, estão dispostos estes principais dados obtidos através dos resultados das simulações.

Apesar do êxito obtido, vale frisar que as simulações realizadas de acordo com este planejamento experimental proposto levaram horas para se concretizarem. O tempo computacional gasto para a simulação de todos os dezessete pontos foi uma média de aproximadamente três horas e trinta minutos.

4.1 O programa para análise dos resultados

Para a análise destes resultados obtidos no CeSFaMB[™], foi usado o *software* **StatSoft, Inc.STATISTICA, version 10** ou simplesmente *Statistica*. Usando este programa é possível avaliar a relevância de cada variável independente no processo, além de interações combinadas entre essas variáveis, sobre cada variável dependente. Com as variáveis dependentes e independentes, o programa possui um modelo linear que ajusta ao sistema e contempla todos os efeitos principais com iterações até ordem três. A equação geral que descreve esse modelo é a seguinte:

$$y^{c} = \alpha_{0} + \alpha_{1}z_{1} + \alpha_{2}z_{2} + \alpha_{3}z_{3} + \beta_{12}z_{1}z_{2} + \beta_{13}z_{1}z_{3} + \beta_{23}z_{2}z_{3} + \gamma_{123}z_{1}z_{2}z_{3}$$
(9)

Onde:

y – variável dependente analisada;

 $z_{i=1,2,3}$ – variável independente;

 $\alpha_{i; i=1,2,3}$; – parâmetros lineares do modelo;

 $\beta_{ij,i=1,2,3; j=1,2,3; i \neq j}$ – parâmetros de interação entre duas variáveis independentes do modelo;

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

O conjunto de variáveis independentes para cada simulação é distinto e assim foi construída a Tabela 14 com o objetivo de organizar cada valor referente a cada simulação. A Figura 9 representa um cubo que representa os pontos axiais e o ponto central, referentes ao planejamento.

Pontos	Vazão de Biomassa (QB)	Vazão de Vapor (QS)	Vazão de Oxigênio (QO ₂)						
1	2,78E-04 (-1)	8,89E-05 (-1)	8,75E-05 (-1)						
2	2,78E-04 (-1)	2,67E-04 (1)	1,19E-04 (1)						
3	2,78E-04 (-1)	8,89E-05 (-1)	1,19E-04 (1)						
4	2,78E-04 (-1)	2,67E-04 (1)	8,75E-05 (-1)						
5	1,67E-04 (1)	8,89E-05 (-1)	8,75E-05 (-1)						
6	1,67E-04 (1)	2,67E-04 (1)	1,19E-04 (1)						
7	1,67E-04 (1)	8,89E-05 (-1)	1,19E-04 (1)						
8	1,67E-04 (1)	2,67E-04 (1)	8,75E-05 (-1)						
9	2,22E-04 (0)	1,78E-04 (0)	1,03E-04 (0)						
10	2,06E-04 (0)	9,83E-05 (0)	1,73E-04 (0)						
11	2,06E-04 (0)	1,09E-04 (0)	1,82E-04 (0)						
12	2,06E-04 (0)	9,83E-05 (0)	1,82E-04 (0)						
13	2,06E-04 (0)	1,09E-04 (0)	1,73E-04 (0)						
14	2,39E-04 (0)	9,83E-05 (0)	1,73E-04 (0)						
15	2,39E-04 (0)	1,09E-04 (0)	1,82E-04 (0)						
16	2,39E-04 (0)	9,83E-05 (0)	1,82E-04 (0)						
17	2,39E-04 (0)	1,09E-04 (0)	1,73E-04 (0)						
	Valores para as vazões em kg*s ⁻¹								

Tabela 14: Denominação dos pontos simulados no CeSFaMB™.



Figura 9: Cubo representando o planejamento experimental.

4.2 Resultado para as análises estatísticas

A seguir serão apresentados os resultados obtidos no *Statistica*, de acordo com as análises de sensibilidade feitas sobre as variáveis dependentes, considerando todas as variáveis independentes e suas respectivas interações, conforme descrito no modelo linear nos parâmetros apresentado neste capítulo.

Com o programa, foi possível obter todos os parâmetros lineares referentes ao modelo, assim como os parâmetros de interação. Outros dados importantes obtidos nas tabelas são o valor p (ou p-level), com o qual é possível avaliar a relevância de cada parâmetro em função do nível de significância admitido; os limites do intervalo de confiança; a curvatura, caso ela seja relevante ou não; o valor do coeficiente de determinação para o modelo, indicando se o ajuste foi razoável; o erro puro; além de gráficos referentes a ao "plot" de probabilidade normal do erro e o histograma do erro.

4.2.1 Análise para o gás hidrogênio (H₂)

Conforme o modelo linear, considerando todas as interações entre as variáveis independentes, obtêm-se as Tabelas 15 e 16 para o gás hidrogênio:

Effect Estimates; Var.: H ₂ ; R-sqr= 0,8163; Adj:,63261 (Analises João Paulo - H ₂) 2**(3-0)											
design; MS Pure Error=,3040092 DV: H ₂ .											
	Effect	Std Err Pure Err	р	Coeff	Std Err Coeff	-95% Cnf. Limt	95% Cnf. Limt				
Mean/Interc.	2,21014	0,194939	0,00003	2,21014	0,194939	1,76061	2,659667				
Curvatura	-2,33652	0,535836	0,002411	-1,16826	0,267918	-1,78608	-0,550440				
(1)QB	1,32023	0,389878	0,009553	0,66011	0,194939	0,21058	1,109642				
(2)QS	-0,44188	0,389878	0,289880	-0,22094	0,194939	-0,67047	0,228592				
(3)QO ₂	-0,73898	0,389878	0,094636	-0,36949	0,194939	-0,81902	0,080042				
β_{12}	-0,04743	0,389878	0,906184	-0,02371	0,194939	-0,47324	0,425817				
β_{13}	0,04748	0,389878	0,906085	0,02374	0,194939	-0,42579	0,473267				
β_{23}	0,15088	0,389878	0,708862	0,07544	0,194939	-0,37409	0,524967				
γ ₁₂₃	0,04463	0,389878	0,911695	0,02231	0,194939	-0,42722	0,471842				

Tabela 15: Análise de dados referentes ao gás hidrogênio.

Tabela 16: Análise ANOVA para o gás hidrogênio.

	SS	df	MS	F	Р
Curvatura	5,78046	1	5,780460	19,01410	0,002411
(1)QB	3,48599	1	3,485988	11,46672	0,009553
(2)QS	0,39051	1	0,390507	1,28452	0,289880
(3)QO2	1,09217	1	1,092168	3,59255	0,094636
β_{12}	0,00450	1	0,004498	0,01480	0,906184
β_{13}	0,00451	1	0,004508	0,01483	0,906085
β_{23}	0,04553	1	0,045527	0,14975	0,708862
γ ₁₂₃	0,00398	1	0,003983	0,01310	0,911695
Pure Error	2,43207	8	0,304009		
Total SS	13,23971	16			

Através de uma análise dos efeitos obtidos nas Tabela 15 e 16, foi observada uma variável relevante, a vazão de biomassa (QB). Além de possuir efeito relevante ao processo, esta variável possui efeito direto em relação à variável dependente. Outra verificação importante que podemos obter é de que a curvatura é relevante. A confirmação da influência de determinado fator à variável dependente é verificada através do valor de p, sendo que para p < 0,05, o nível de confiança é de ao menos 95%. Com uma distribuição em um diagrama de Pareto, é possível visualizar melhor essas informações.



Figura 10: Representação do diagrama de Pareto para o gás hidrogênio.

A relevância da curvatura indica que efeitos quadráticos devem ser investigados na variável dependente. Outras conclusões podem ser obtidas através das outras variáveis e parâmetros. As vazões de oxigênio e vapor d'água possuem efeito contrário ao da variável dependente além do parâmetro β_{12} . Todavia os parâmetros de interação β_{13} , β_{23} e γ_{123} possuem efeito favorável ao da variável dependente. A Tabela 17 mostra a análise refeita considerando agora apenas os fatores relevantes em relação à resposta do H₂.

Effect Estimates: Var.:H ₂ : R-sgr=.6999: Adi:.65703 (Analises João Paulo - H ₂) 2**(3-0)										
design; MS Pure Error=,3040092 DV: H_2 .										
	Effect Std Err Pure Err p Coeff Std Err Coeff -95% Cnf. Limt 95% Onf. Limt									
Mean/Interc.	2,21014	0,194939	0,00003	2,21014	0,194939	1,76061	2,659667			
Curvatura	-2,33652	0,535836	0,002411	-1,16826	0,267918	-1,78608	-0,550440			
(1)QB	1,32023	0,389878	0,009553	0,66011	0,194939	0,21058	1,109642			

Tabela 17: Apenas efeitos significantes para o gás hidrogênio.

4.2.2 Análise para o gás Monóxido de Carbono (CO)

Conforme o modelo linear, considerando todas as interações entre as variáveis independentes, obtém-se as Tabelas 18 e 19 para o gás monóxido de carbono:

Effect Estimates; Var.:CO; R-sqr=,88067; Adj:,76135 (Analises João Paulo - CO) 2**(3-0)										
design; MS Pure Error=7,288533 DV: CO.										
Effect Std Err p Coeff Std Err -95% 95% Coeff Coeff Coff. Limt Cnf. Lim										
Mean/Interc.	10,7843	0,954498	0,00003	10,78426	0,954498	8,58319	12,98534			
Curvatura	-2,8884	2,623664	0,302959	-1,44420	1,311832	-4,46929	1,58089			
(1)QB	7,0890	1,908996	0,005927	3,54451	0,954498	1,34344	5,74559			
(2)QS	-11,7461	1,908996	0,000273	-5,87306	0,954498	-8,07414	-3,67199			
(3)QO ₂	0,1746	1,908996	0,929385	0,08729	0,954498	-2,11379	2,28836			
β_{12}	-3,9086	1,908996	0,074801	-1,95431	0,954498	-4,15539	0,24676			
β_{13}	1,7899	1,908996	0,375889	0,89494	0,954498	-1,30614	3,09601			
β_{23}	1,8768	1,908996	0,354330	0,93841	0,954498	-1,26266	3,13949			
γ ₁₂₃	0,7001	1,908996	0,723316	0,35006	0,954498	-1,85101	2,55114			

Tabela 18: Análise de dados referentes ao monóxido de carbono.

Tabela 19: Análise ANOVA para o monóxido de carbono.

SS	df	MS	F	р

Curvatura	8,8336	1	8,8336	1,21198	0,302959
(1)QB	100,5086	1	100,5086	13,78996	0,005927
(2)QS	275,9429	1	275,9429	37,85987	0,000273
(3)QO2	0,0610	1	0,0610	0,00836	0,929385
β_{12}	30,5547	1	30,5547	4,19216	0,074801
β_{13}	6,4073	1	6,4073	0,87909	0,375889
β_{23}	7,0449	1	7,0449	0,96658	0,354330
γ ₁₂₃	0,9804	1	0,9804	0,13451	0,723316
Pure Error	58,3083	8	7,2885		
Total SS	488,6415	16			

Através de uma análise dos efeitos, alguns dados importantes merecem destaque nas Tabelas 18 e 19. As vazões de biomassa (QB) e vapor (QS) possuem relevância em relação à variável dependente. Porém, enquanto a primeira possui efeito favorável à formação de CO, a segunda possui efeito contrário à variável dependente. Com uma distribuição em um diagrama de Pareto, é possível visualizar melhor essas a significância das variáveis.



Figura 11: Representação do diagrama de Pareto para o monóxido de carbono.

Outros dados que podem serem obtidos através dos resultados diz respeito aos parâmetros de interação, sendo que estes não possuem relevância ao processo, além da variável QO₂. Na análise desta variável, a curvatura não tem significância. A vazão de oxigênio e os parâmetros β_{13} , β_{23} , e γ_{123} possuem relação direta com a variável dependente, enquanto o parâmetro β_{12} possui efeito contrário. Assim, é possível obter a Tabela 20 com apenas os fatores relevantes em relação à resposta desta variável.

Effect Estimates; Var.:CO; R-sqr=,7704; Adj:,7376 (Analises João Paulo - CO) 2**(3-0)									
design; MS Pure Error=7,288533 DV: CO.									
	Effect Std Err Pure Err p Coeff Std Err Coeff -95% Cnf. Limt 95% Cnf. Limt								
Mean/Interc.	10,7843	0,954498	0,00003	10,78426	0,954498	8,58319	12,98534		
(1)QB	7,0890	1,908996	0,005927	3,54451	0,954498	1,34344	5,74559		
(2)QS	-11,7461	1,908996	0,000273	-5,87306	0,954498	-8,07414	-3,67199		

Tabela 20: Apenas efeitos relevantes para o monóxido de carbono.

4.2.3 Análise para o gás Dióxido de Carbono (CO₂)

Conforme o modelo linear, considerando todas as interações entre as variáveis independentes, se obtém as Tabelas 21 e 22 para o gás dióxido de carbono:

Effect Estimates; Var.:CO ₂ ; R-sqr=,90486; Adj:,80972 (Analises João Paulo - CO ₂) 2**(3-										
0) design; MS Pure Error=3,071257 DV: CO ₂ .										
	Effect Std Err Pure Err p Coeff Std Err Coeff Coeff Cnf. Limt Cnf. Lim									
Mean/Interc.	45,92731	0,619602	0,000000	45,92731	0,619602	44,49851	47,35612			
Curvatura	7,96860	1,703124	0,001584	3,98430	0,851562	2,02059	5,94800			
(1)QB	3,45288	1,239205	0,023691	1,72644	0,619602	0,29763	3,15524			
(2)QS	-6,45803	1,239205	0,000811	-3,22901	0,619602	-4,65782	-1,80021			
(3)QO ₂	-2,15588	1,239205	0,120095	-1,07794	0,619602	-2,50674	0,35087			
β_{12}	4,69303	1,239205	0,005334	2,34651	0,619602	0,91771	3,77532			
β_{13}	-1,58413	1,239205	0,236968	-0,79206	0,619602	-2,22087	0,63674			
β_{23}	-0,64123	1,239205	0,618843	-0,32061	0,619602	-1,74942	1,10819			

Tabela 21: Análise de dados referentes ao dióxido de carbono.

	SS	df	MS	F	р
Curvatura	67,2338	1	67,23375	21,89128	0,001584
(1)QB	23,8447	1	23,84469	7,76382	0,023691
(2)QS	83,4122	1	83,41217	27,15897	0,000811
(3)QO2	9,2956	1	9,29559	3,02664	0,120095
β_{12}	44,0490	1	44,04897	14,34233	0,005334
β_{13}	5,0189	1	5,01890	1,63415	0,236968
β_{23}	0,8223	1	0,82234	0,26775	0,618843
Y ₁₂₃	0,0037	1	0,00375	0,00122	0,972998
Pure Error	24,5701	8	3,07126		
Total SS	258,2502	16			

Tabela 22: Análise ANOVA para o dióxido de carbono.

Com os dados obtidos, é possível obter várias conclusões em relação à Tabela 21 e 22. O primeiro deles diz respeito às variáveis e parâmetros relevantes. A vazão de biomassa (QB) e a vazão de vapor (QS) possuem relevância em relação à variável dependente, assim como o parâmetro de interação β_{12} . Sobre esses dados, enquanto a vazão de biomassa (QB) e o parâmetro β_{12} possuem efeito favorável em relação à variável dependente, a vazão de vapor (QS) possui efeito contrário. Outro dado importante também a ser analisado é a questão da curvatura. Essa é relevante e a importância da mesma implica na existência de termos quadráticos que irão influenciar na resposta da variável dependente. A relevância dos dados pode ser identificada por um diagrama de Pareto.



Figura 12: Representação do diagrama de Pareto para o dióxido de carbono.

Demais dados conclusivos a serem mencionados a respeito das Tabela 21 e 22 mostram que os demais parâmetros e a vazão de oxigênio não possuem relevância e todos eles possuem efeito contrário ao da variável dependente. Assim pode ser obtida a Tabela 23 com apenas os dados relevantes referentes à resposta para o CO₂.

Tabela 23: Apenas efeitos relevantes para o dióxido de carbono.

Effect Estimates; Var.:CO ₂ ; R-sqr=,84623; Adj:,79498 (Analises João Paulo - CO ₂) 2**(3-							
0) design; MS Pure Error=3,071257 DV: CO ₂ .							
	Effect Std Err Pure Err p Coeff Std Err -95% 99 Coeff Coeff Coeff Cnf. Limt Cnf.						
Mean/Interc.	45,92731	0,619602	0,000000	45,92731	0,619602	44,49851	47,35612
Curvatura	7,96860	1,703124	0,001584	3,98430	0,851562	2,02059	5,94800
(1)QB	3,45288	1,239205	0,023691	1,72644	0,619602	0,29763	3,15524
(2)QS	-6,45803	1,239205	0,000811	-3,22901	0,619602	-4,65782	-1,80021
β_{12}	4,69303	1,239205	0,005334	2,34651	0,619602	0,91771	3,77532

4.2.4 Análise para a água (H₂O)

Conforme o modelo linear, considerando todas as interações entre as variáveis independentes, obtém-se as Tabelas 24 e 25 para a água:

Effect Estimates; Var.:H ₂ O; R-sqr=,96776; Adj:,93552 (Analises João Paulo - H ₂ O) 2**(3-									
0) design; MS Pure Error=4,392092 DV: H_2O .									
	, , , , , , , , , , , , , , , , , , , ,								
	Effect	Std Err Pure Err	р	Coeff	Std Err Coeff	-95% Cnf. Limt	95% Cnf. Limt		
Mean/Interc.	39,9882	0,740953	0,000000	39,98816	0,740953	38,27952	41,69680		
Curvatura	-1,5470	2,036685	0,469292	-0,77352	1,018343	-3,12182	1,57478		
(1)QB	-12,8640	1,481906	0,000024	-6,43199	0,740953	-8,14063	-4,72335		
(2)QS	18,6077	1,481906	0,000002	9,30384	0,740953	7,59520	11,01248		
(3)QO ₂	3,4809	1,481906	0,046760	1,74044	0,740953	0,03180	3,44908		
β_{12}	-0,9590	1,481906	0,535655	-0,47951	0,740953	-2,18815	1,22913		
β_{13}	0,0704	1,481906	0,963287	0,03519	0,740953	-1,67345	1,74383		
β_{23}	-1,0926	1,481906	0,482015	-0,54629	0,740953	-2,25493	1,16235		
γ ₁₂₃	-0,3631	1,481906	0,812620	-0,18154	0,740953	-1,89018	1,52710		

Tabela 24: Análise de dados referente a água.

Tabela 25: Análise ANOVA para a água.

	SS	df	MS	F	р
Curvatura	2,534	1	2,5341	0,5770	0,469292
(1)QB	330,964	1	330,9637	75,3544	0,000024
(2)QS	692,491	1	692,4911	157,6677	0,000002
(3)QO2	24,233	1	24,2330	5,5174	0,046760
β_{12}	1,839	1	1,8395	0,4188	0,535655
β_{13}	0,010	1	0,0099	0,0023	0,963287
β_{23}	2,387	1	2,3874	0,5436	0,482015
γ ₁₂₃	0,264	1	0,2636	0,0600	0,812620
Pure Error	35,137	8	4,3921		
Total SS	1089,859	16			

Com a análise de efeitos a partir dos dados obtidos, é possível observar algo que merece destaque. As três variáveis independentes possuem relevância e são importantes na resposta para esta variável dependente. Todavia, enquanto a vazão de biomassa (QB) possui efeito contrário, as vazões de vapor e oxigênio possuem efeito direto em relação à variável dependente. Um diagrama de Pareto pode ilustrar bem a relevância das variáveis mencionadas.



Figura 13: Representação do diagrama de Pareto para a água.

No que diz respeito aos parâmetros de interação entre as variáveis independentes, estes não possuem relevância. Na análise desta variável, a curvatura não tem significância. Assim os dados significantes referentes a esta análise esta dispostos na Tabela 26.

Effect Estimates; Var.:H ₂ O; R-sqr=,96131; Adj:,95238 (Analises João Paulo - H ₂ O) 2**(3-							
0) design; MS Pure Error=4,392092 DV: H_2O .							
	Effect	Std Err Pure Err	р	Coeff	Std Err Coeff	-95% Cnf. Limt	95% Cnf. Limt

Tabela 26: Apenas efeitos relevantes para a H₂O.

Mean/Interc.	39,9882	0,740953	0,000000	39,98816	0,740953	38,27952	41,69680
(1)QB	-12,8640	1,481906	0,000024	-6,43199	0,740953	-8,14063	-4,72335
(2)QS	18,6077	1,481906	0,000002	9,30384	0,740953	7,59520	11,01248
(3)QO ₂	3,4809	1,481906	0,046760	1,74044	0,740953	0,03180	3,44908

4.2.5 Análise para a perda de carga (ΔP)

Conforme o modelo linear, considerando todas as interações entre as variáveis independentes, obtém-se a Tabela 27 para a queda de pressão total, que é equivalente a soma da perda de carga no leito somada à perda de carga na placa porosa:

Effect Estimates; Var.: ΔP; R-sqr=,86278; Adj:,72555 (Analises João Paulo - ΔP) 2**(3-0)										
design; MS Pure Error=,059225 DV: ∆P										
	1	1								
	Std Frr95%95%									
	Effect	Pure Err	р	р	р	Coeff	Coeff	Cnf. Limt	Cnf. Limt	
Mean/Interc.	5,99000	0,086041	0,000000	5,990000	0,086041	5,791588	6,188412			
Curvatura	-1,16000	0,236505	0,001187	-0,580000	0,118253	-0,852691	-0,307309			
(1)QB	-0,18500	0,172083	0,313698	-0,092500	0,086041	-0,290912	0,105912			
(2)QS	-0,39500	0,172083	0,050834	-0,197500	0,086041	-0,395912	0,000912			
(3)QO ₂	-0,43500	0,172083	0,035374	-0,217500	0,086041	-0,415912	-0,019088			
β_{12}	-0,27000	0,172083	0,155284	-0,135000	0,086041	-0,333412	0,063412			
β_{13}	0,02000	0,172083	0,910340	0,010000	0,086041	-0,188412	0,208412			
β_{23}	0,39000	0,172083	0,053193	0,195000	0,086041	-0,003412	0,393412			
Y ₁₂₃	0,41500	0,172083	0,042400	0,207500	0,086041	0,009088	0,405912			

Tabela 27: Análise de dados referente a queda de pressão (ΔP).

Com os dados obtidos na Tabela 27 foi possível obter informações importantes. Uma delas é a de que, entre variáveis e parâmetros, a vazão de oxigênio e o parâmetro de interação entre as três variáveis independentes são os únicos relevantes. Entretanto o parâmetro γ_{123} possui resposta direta em relação à variável dependente, enquanto a vazão de oxigênio possui efeito contrário. Na análise desta variável, mais uma vez a curvatura possui relevância, o que indica a existência de termos quadráticos que irão afetar a resposta em relação à variável dependente. As outras variáveis e parâmetros não possuem relevância. A avaliação desta da queda de pressão foi feita com o objetivo de verificar se há variáveis independentes e/ou parâmetros de interação relevantes na resposta para esta variável e quais variáveis e parâmetros são estes.

4.3 Resultados para verificação do modelo

Aqui será feita uma abordagem sobre como foi o comportamento das variáveis dependentes em relação ao modelo linear proposto. Serão utilizados alguns critérios para a verificação se este modelo se apresentou justificável ou não na relação entre variáveis independentes com a respectiva variável dependente.

4.3.1 Avaliação para o H₂

Com os dados fornecidos pela Tabela 17, foi possível verificar que, com a significância de uma curvatura, o modelo linear não se apresentou razoável em relação a esta variável dependente. Além da curvatura, serão apresentados outros critérios que justificam a inviabilidade do uso do modelo linear para com a resposta desta variável dependente. Um dos critérios foi através do coeficiente de determinação (R²). Foi possível ver que com um valor de R² = 0,8163, o modelo não foi satisfatório para a resposta dessa variável dependente. Com a análise residual, foi notado que os resultados não foram razoáveis para o modelo e o histograma dos resíduos prevê evidências adicionais deste fato ao se desviar de uma curva normal.



Figura 14: Representação do histograma do resíduo bruto para o gás hidrogênio.



Figura 15: Probabilidade Normal do erro bruto para o gás hidrogênio.

Além do histograma, o programa fornece também outros gráficos que podem ser usados como justificativa para a interpretação dos resultados e verificação da validação do modelo linear para a resposta desta variável. Um deles está apresentado no "*Plot* de Probabilidade Normal", no qual os desvios do ponto da reta indicam o correspondente desvio da normalidade.

4.3.2 Avaliação para o CO

Com os dados fornecidos pela Tabela 20, foi possível verificar que a curvatura não possui significância em relação à resposta para esta variável. É possível então afirmar que não há a presença de termos quadráticos influenciando na resposta da variável e o modelo linear, pode parecer razoável. Entretanto, ao seguir para a verificação se o modelo linear esta adequado para esta variável, constata-se que valor obtido para $R^2 = 0,88067$ não está bom para afirmar que o modelo linear atende bem a esta variável dependente. Para a análise dos resíduos, foram obtidas as representações do histograma para o erro bruto e "*Plot* da probabilidade normal" do erro bruto.



Figura 16: Representação do histograma do erro bruto para o monóxido de carbono.



Figura 17: Probabilidade Normal do erro bruto para o monóxido de carbono.

A Figura 17 referente ao "*Plot* da probabilidade normal" do erro puro mostra resultados ao qual o modelo linear pode ser razoavelmente adequado para essa resposta. Porém quando se é feita uma análise do erro puro, foi verificado um valor para o quadrado deste de *Erro Puro*² = 7,288533. Este valor é muito alto. A Figura 16, representando o histograma, mostra um grande desvio da normalidade. Assim, com isso, não se recomenda usar o modelo linear para ajuste da resposta para essa variável dependente.

4.3.3 Avaliação para o CO₂

A partir dos dados fornecidos pela Tabela 23, foi possível verificar que, com a relevância da curvatura, o modelo linear não se apresentou satisfatório em relação a esta variável dependente. Outros critérios podem justificar a questão da inviabilidade do uso para o modelo linear como resposta desta variável dependente. Um dos critérios foi através do coeficiente de determinação (R^2). Foi possível verificar um valor para R^2 =

0,90486. Com esses dados não é possível validar ou invalidar o modelo. Na análise seguinte foi obtido o histograma do erro bruto.



Figura 18: Histograma do erro bruto para o dióxido de carbono.



Figura 19: Probabilidade Normal do erro bruto para o dióxido de carbono.

Com o histograma do erro, uma baixa frequência de pontos pode ser verificada além da curva. Outro dado importante são os pontos observados na Figura 19. Com a análise deste é possível dizer que, através deste critério, o modelo pode representar razoavelmente a resposta para esta variável dependente.

4.3.4 Avaliação para a H_2O

Com os dados obtidos através da Tabela 26, pode-se verificar que o modelo linear foi muito bem predito para a resposta desta variável independente. Para comprovar isso, foram utilizados critérios para a consolidação deste. O primeiro deles foi o coeficiente de determinação (R^2) e este para este foi obtido valor $R^2 = 0.96776$. Outro critério que é em relação à análise residual.



Figura 20: Histograma do erro bruto para a água.


Figura 21: Probabilidade normal do erro bruto para a água.

Outros dados referentes ao modelo podem ser obtidos através das análises feitas no Statistica. Estas análises de uma forma geral estão relacionadas a dois testes de normalidade para o resíduo. Estes são o teste de Shapiro-Wilk W e o teste de Kolmogorov-Smirnov.

O teste de Shapiro-Wilk tem sido mais usado para se testar normalidade. Se o valor calculado de W é estatisticamente significativo (para p = 0,05) rejeita-se a hipótese que a distribuição estudada é normal, ou seja, se $p \ge 0,05$ a distribuição do erro é normal. Tomando como exemplo a análise do hidrogênio, é possível obter a Figura 22 para o teste de normalidade de Shapiro-Wilk. Nesta é possível observar que o parâmetro p é igual a 0,001, ou seja, a distribuição do erro não é normal.



Figura 22: Teste de Shapiro Wilk para o gás hidrogênio.

O teste de Kolmogorov-Smirnov baseia-se na máxima diferença entre a distribuição acumulada da amostra e distribuição acumulada esperada. Se o valor calculado do parâmetro D é estatisticamente significativo (para p = 0,05), rejeita-se a hipótese que a distribuição estudada é normal, ou seja, para que a distribuição do erro seja considerada normal, o valor p deve ser $p \ge 0,05$. Continuando com o exemplo para a análise do hidrogênio, é possível obter a Figura 23. Nesta é possível visualizar que o valor de p é menor que 0,05, concluindo assim que o erro não segue uma distribuição normal para o resíduo.

Portanto, de acordo com os testes de normalidade analisados para o hidrogênio, foi possível concluir que o resíduo não segue uma distribuição normal. É possível na analisar estes testes para as demais variáveis dependentes e assim verificar se o resíduo referente a cada variável dependente, segue uma distribuição normal ou não.



Figura 23: Teste de Kolmogorov-Smirnov para o gás hidrogênio.

5 Conclusões e sugestões para trabalhos futuros

No processo de gaseificação, entre todos os produtos obtidos, o gás de síntese $(H_2 + CO)$ e o gás hidrogênio (H_2) são dois que merecem certo destaque. Como foi mencionada no primeiro capítulo deste trabalho, uma fonte rica em carbono e além de tudo renovável, a biomassa vem chamando grande atenção no cenário internacional. Porém na gaseificação há também seus inconvenientes. No processo, é desejável emitir um mínimo de CO₂ possível, com um objetivo de não agredir o meio ambiente. Assim é possível chegar a uma primeira conclusão de que se deve obter um máximo de produto no que diz respeito à CO e H₂. Por outro lado, deve-se obter um mínimo de CO₂ e H₂O. A minimização deste último produto deve ser feita porque uma grande quantidade de água no produto implica em uma não conversão de um dos agentes responsáveis pela gaseificação em produto.

O produto final obtido varia bastante com as variáveis independentes que foram propostas no trabalho para serem analisadas. Este trabalho avalia como estas variáveis independentes poderão vir a afetar as variáveis dependentes. Assim se o objetivo do processo for determinado produto, a análise prévia pode prever vários resultados que possam vir a ser esperados para com o processo.

Com as análises feitas no capitulo anterior, foi possível observar que a vazão de biomassa (QB) é extremamente importante. Com uma análise geral, percebeu-se que essa variável é relevante, significante e possui relação direta com os gases hidrogênio e monóxido de carbono. Importante também frisar é a relevância que esta variável independente tem com a água. Portanto pode-se afirmar que um aumento na alimentação de bagaço ao reator, acarretaria num aumento da produção de hidrogênio e CO e em uma diminuição da quantidade de água produzida. Como as vazões dos agentes possuem relevância e influenciam diretamente na produção de água, uma diminuição da quantidade destes poderia alcançar condições ótimas. Porém deve-se frisar que o aumento de QB também é relevante e tem relação direta à produção de CO₂.

Em relação aos parâmetros de interação entre as variáveis independentes, em quase momento algum tiveram relevância sobre a variável dependente; apenas na análise do dióxido de carbono.

Na análise da curvatura para algumas das variáveis dependentes, ela se mostrou significante. Variáveis de saída como H_2 , CO_2 e H_2O tiveram a sua curvatura relevante, ou seja, a existência de termos quadráticos. Portanto, apesar de não se saber realmente qual termo interfere de fato na resposta para a variável, é possível afirmar que este termo existe e é relevante.

Com os resultados para a verificação do modelo linear em relação à resposta da variável dependente, foi verificado que, para os produtos com interesse comercial, o modelo não se apresentou de maneira satisfatória. Assim não se pode dizer com exatidão se o modelo linear é adequado para este planejamento experimental.

Fazendo uma avaliação geral deste trabalho, foi possível concluir que a modelagem do processo de gaseificação é de extrema dificuldade, além de que a tentativa de simular dados para este processo demanda demasiado tempo computacional sendo que alguns dados aproximam do que é o processo na realidade. Apesar das

dificuldades encontradas, algumas respostas qualitativas foram obtidas com sucesso. O trabalho se mostrou eficaz no sentido de obter um conhecimento maior através do complexo processo da gaseificação com o bagaço de cana-de-açúcar e isso se torna importante na elaboração de trabalhos futuros.

Propostas futuras como continuidade deste trabalho seriam realizar análises de superfície para as principais variáveis que não atenderam ao modelo linear; além do uso de diferentes modelos para verificar qual melhor responde bem para a saída dos principais gases de interesse do processo de gaseificação.

Outro trabalho importante pode ser uma modelagem mais específica do poder calorífico e verificar como este pode interferir nas variáveis de saída do processo.

Bibliografia

- Andrade, R. V. (2007). Gaseificação de Biomassa: Uma Análise Teórica e Experimental. Itajubá - MG.
- 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.
- Arakaki, M. T. (2013). Análise do Processo de Gaseificação do Bagaço de Cana-deaçúcar em Equipamento de Leito Fluidizado Borbulhante - Projeto Final. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ.
- Basu, P. (2006). *Combustion and Gasification in Fluidized Beds*. Taylor & Francis Group, LLC.
- Basu, P. (2010). *Biomass gasification and pyrolysis Pratical design and theory*. Elsevier.
- 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., & Montgomery, D. C. (2003). *Plnejamento de Experimentos utilizando o Statistica*. Rio de Janeiro: E-pappers.
- 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 Techhology*, 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.
- Cruz, M. E., Leiroz, A. J., de Souza Jr., M. B., Barreto Jr., A. G., Verissimo, G. L., Pedroni, A. F., et al. (2013). Predição das Características do Produto Final de um Processo de Gaseificação de Bagaço de Cana em Gaseificador de Leito Fluidizado Empregando Modelagem e Simulação - Relatório Parcial no 3. Projeto COPPETEC.
- Cruz, M., Leiroz, A., De Souza Jr., M., Barreto Jr., A., Pinho, J., & Castellanos, A. (2012). Predição das Características do Produto Final de um Processo de Gaseificação de Bagaço de Cana em Gaseificador de Leito Fluidizado Empregando Modelagem e Simulação. Rio de Janeiro.
- de Castro, A. J., Cassiano, D. A., & Ferreira, N. L. (2009). Gaseificação do bagaço de cana-de-açúcar: modelagem, análise e comparação com sistema real. *Redalyc*.
- Geldart, D. (1973). Types of Gas Fluidization. Powder Technology, 285-292.
- 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., & Sànchez, 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.
- 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.
- Macedo, I. C. (Abril de 2007). Situação atual e perspectivas do etanol. *Estudos Avançados, 21*(59), pp. 157-165.
- McKendry, P. (2002). Energy production from biomass (part 3): gasification technologies. *Bioresource Technology* 83, 55-63.
- Nemer, L. C. (2010). *Modelagem do processo de gaseificação de biomassa empregando redes neuronais - Projeto Final*. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ.
- Nemtsov, D., & Zabaniotou, A. (2008). Mathematical modelling and simulation approaches of agricultural residues air gasification in a bubbling fluidized bed reactor. *Chemical Engineering Journal*.
- 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 steamoxygen gasification of biomass in a 100 KWth CFB gasifier. *15th European Biomass Conference and Exhibition - From Research to Market*, pp. 1-8.
- Souza-Santos, M. L. (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. (2004). Solid Fuels Combustion and Gasification. Modeling, Simulation, and Equipment Operation. New York: Marcel Dekker.
- Souza-Santos, M. L. (2010). Solid Fuels Combustion and Gasification: modeling, simulation, and equipment operations. New York: CRC Press - Taylor and Francis Group.

- Souza-Santos, M. L. (2012). CeSFaMB®/CSFMB© Comprehensive Simulator of Fluidized and Moving Bed Equipment.
- Souza-Santos, M. L. (2013). Manual of Comprehensive Simulator of Fluidized and Moving Bed Equipment.
- Wu, H., Hanna, M., & Jones, D. (2012). Fluidized-bed gasification of dairy manure by Box-Behnken design. *Waste Management & Research*, pp. 506-511.

Apêndice A

Parâmetros de convergência numérica

Estes são os primeiros parâmetros a serem inseridos no simulador e os mesmos são fundamentais para uma simulação precisa, aproximando do que ocorre com o processo real. Tais parâmetros estão relacionados com métodos numéricos para resolução de equações diferenciais, critérios de convergência numérica, etc.

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 22 apresenta a interface inicial do simulador, com os primeiros parâmetros a serem definidos e uma descrição dos mesmos que será feita abaixo.

Eile Yiew Rgn Window	1						- 4
	-	(E)	X	0	()	Input.	C\Users\Aluno\Desktop\Testers\1000gr_401
Input	Duput	2UT	Cloge	Exit	Bun	Quiput	http://tester/1000gr_40%02_RE40_30%vapor
Case Identification:							
Title (TITLE)	Gaselicador leto f	uidizado borbulhante PETROBRAS		-			
Subtile (TITLE2)	Gaseifcador espar	hol adquirido pela PETROBRAS		-			
Print Control Parameters							
IT Print intermediate detail	h .						
Numerical Convergence Pa	arameters						
Guessed minimum fractional	s conversion of fixed carbon in the	bed (CEMINP)	r	70			
Guessed maximum tractions	al conversion of fixed-carbon in the	bed (CCM40/P)	1	90			
Convergence criterion for #	he convergence of fixed-carbon in I	the bed (CCDEVP)	1	10			
Guessed % conversion of a	abootent in the bed (ABSCP)		-	0			
Guessed % conversion of v	rolatiles in the bed (VOLCP)			0			
Maximum deviation (%) for th	the convergence of other fractions	but fixed-carbon (AVDEVP)		0			
Guessed temperature, K (TI	GUESSI			0			
Convergence criterion for th	he numerical integration of mass an	d energy (TOLMB)	1.5	0-06			
		(1) (2)	(3) (4) (5) (6	1 (7) 181 (9)	(10)		
Audiary convergence para	meters (CONV)			2 0 0 0	0		
Auxiliary convergence para	eneters (DUMP)				0		
			of of of of	of of of	1		
		MANDAIT	MADINICY				
Maximum numbers of iterate	ione for carbon and volatile conv	90	0				
Equipment Data - Class De	scription						
Operating Mode (IGASF)	Guiller	-					
	Ingener	-1					1
							15.50 27/11/2012
A 199	0 4 6						FT - Berlin for day 1558
							27/11/201

Figura 24: Interface inicial do CeSFaMB[™] com os primeiros parâmetros de convergência numérica.

- a) Porcentagem mínima e máxima de conversão de carbono fixo no leito CCMINP e CCMAXP: Estes parâmetros representam a porcentagem mínima e máxima, respectivamente, de carbono fixo contido na partícula sólida que será transformada em produto durante o processo de gaseificação. A definição destes parâmetros é de extrema importância. Valores muito altos para CCMINP (<30) podem acarretar em inúmeras iterações que não irão convergir para uma solução. Valores relativamente baixos para CCMAXP (<90) poderão ocorrer o mesmo. Assim um intervalo entre esses valores deve ser bem definido, pois caso contrário, as simulações podem ter sua convergência comprometida e/ou ter o tempo de simulação consideravelmente aumentado.</p>
- b) Máximo desvio permitido para a convergência de conversão de carbono fixo no leito CCDEVP: Esse parâmetro está relacionado com o critério de parada do simulador. O valor inserido aqui pelo usuário representa a diferença entre a conversão de carbono fixo suposto e o valor de conversão de carbono fixo calculado pelo programa. Para este parâmetro, deve-se ater, pois a diminuição dos valores pode implicar em boas simulações, todavia pode também resultar em um aumento do tempo de simulação e em qualidade ruim na precisão dos resultados.
- c) Critério de convergência para a integração numérica dos balanços de massa e energia (TOLMB): Este parâmetro é utilizado para definir critério de convergência numérica. Como o parâmetro anterior, deve-se usar o menor valor para obter resultados mais precisos. Porém valores muitos baixos, apesar de apresentarem um erro menor durante a simulação, irão proporcionar uma demanda computacional maior. Assim para alcançar resultados satisfatórios é necessária uma busca por valores baixos, mas que não sejam pequenos suficientes para comprometer as simulações em tempo e resultado.
- d) Fator de convergência ICONV: Estes parâmetros estão relacionados à forma como é determinada as regiões onde ocorrem as distintas etapas dos processos de gaseificação, método de integração das equações diferenciais e a seleção de diferentes métodos numéricos para solucionar as inúmeras equações diferenciais. Nas simulações realizadas neste trabalho, só foram utilizados valores inteiros para os parâmetros ICONV (2) e ICONV (6) que serão posteriormente apresentados em uma tabela.

e) Fator de convergência DUMP: Esta é uma série de 10 parâmetros relacionados à convergência de iterações enquanto cálculos estão sendo feitos através do leito. Para estes, em todas as simulações feitas para este trabalho, não foram utilizados em momento algum valores inteiros.

Na Tabela 28 serão apresentados alguns valores utilizados como parâmetros de convergência numérica. Não foi possível inserir os mesmos parâmetros em todas as simulações, pois em alguns casos as mesmas apresentavam alto custo computacional para convergir a uma solução e em outros a simulação não alcançava convergência. Na coluna principal destacada em verde estão os valores mais utilizados nas simulações e os respectivos na coluna à direita são os utilizados em uma ou outra simulação.

CCMINP	10	
CCMAXP	90	98
CCDEVP	1	
TOLMB	1.0D-6	1.0D-5
ICONV (2)	1	
ICONV (6)	2	

Tabela 28: Parâmetros de convergência numérica.

Anexo I

Este anexo contem todos os dados principais obtidos através das simulações feitas no simulador CeSFaMB™.

Simulação	Ponto 1	Ponto 2	Ponto 3	Ponto 4	Ponto 5	Ponto 6
%O2	100	100	100	100	100	100
RE	0,2	0,4	0,4	0,2	0,2	0,4
Vazão de gás - O2 (kg/s)	8,75E-05	1,19E-04	1,19E-04	8,75E-05	8,75E-05	1,19E-04
Vazão de vapor (kg/s)	8,89E-05	2,67E-04	8,89E-05	2,67E-04	8,89E-05	2,67E-04
T gás entrada (K)	673	673	673	673	673	673
T distribuidor (K)	933,08	981,49	1043,15	865,98	1013,67	1048,70

Simulação	Ponto 1	Ponto 2	Ponto 3	Ponto 4	Ponto 5	Ponto 6
T interm. leito (K)	947,11	991,70	1064,05	868,54	1027,54	1057,25
T final leito (K)	943,96	991,64	1063,98	871,47	1027,47	1057,21
T méd. leito gases de entrada (K)	941,38	988,28	1057,06	868,66	1022,89	1054,39
Perda de carga na placa (kPa)	0,49	1,12	0,58	1,04	0,50	1,12
Perda de carga na placa (mmH2O)	51,00	114,00	59,00	106,00	51,00	115,00
Perda de carga no leito (kPa)	6,35	4,64	5,04	4,33	5,86	4,66
Perda de carga no leito (mmH2O)	648,00	474,00	514,00	442,00	598,00	476,00
Q volumétrica (m ³ /s)	1,0090E-01	1,7130E-03	1,2440E-03	1,1860E-03	8,5400E-04	1,6440E-03
ρ (kg/m³)	4,3440E-01	3,7730E-01	3,7570E-01	5,0500E-01	3,9020E-01	3,3040E-01
Q mássica (kg/s)	4,3831E-02	6,4631E-04	4,6737E-04	5,9893E-04	3,3323E-04	5,4318E-04
Q mássica cinzas (kg/s)	1,6350E-05	1,5360E-05	1,5010E-05	1,4050E-05	9,6450E-06	9,7690E-06
Cp (J/kg K)	1947,00	2014,00	1918,00	1987,00	1906,00	1995,00
Q mássica CO (kg/s)	9,8455E-01	5,6695E-03	1,0212E-02	2,5339E-03	4,1835E-03	1,6848E-03
Q mássica H2O (kg/s)	9,7429E-01	2,8068E-02	1,2729E-02	2,4755E-02	1,1519E-02	3,1257E-02
Q mássica H2 (kg/s)	1,5597E-01	1,5367E-03	1,2485E-03	1,7211E-03	7,3098E-04	5,5008E-04
Q mássica CH4 (kg/s)	2,6439E-02	1,5053E-04	1,7531E-04	2,0813E-04	8,0908E-05	2,3900E-06
Q mássica CO2(kg/s)	2,1944E+00	2,8799E-02	2,1970E-02	2,9338E-02	1,6583E-02	2,0663E-02
Q mássica alcatrão (kg/s)	0,0000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00	9,0486E-04	0,0000E+00	0,0000E+00
Base Total Mássica						
Ar	0	0	0	0	0	0
H2	3,5584	2,3776	2,6714	2,8736	2,1936	1,0127
H2O	22,2284	43,4283	27,2353	41,3327	34,5668	57,544
H2S	0,1391	0,079	0,1127	0,0873	0,0834	0,0343
NH3	0,2722	0,1487	0,2018	0,1825	0,1485	0,0477
NO	0,0103	0,028	0,001	0,0029	0,0026	0,019
NO2	0,0288	0,0178	0,0001	0,061	0,0015	0,0002
N2	0,0394	0,0466	0,0895	0,0109	0,0955	0,0848
N2O	0	0	0	0	0	0
02	0	0	0	0	0	0
SO2	0,1	0,0946	0,1235	0,0715	0,1282	0,1106
СО	22,4624	8,7721	21,8499	4,2307	12,5545	3,1017
CO2	50,064	44,559	47,0085	48,9835	49,7633	38,0405
HCN	0,0011	0,0002	0,0013	0,0003	0,0003	0
CH4	0,6032	0,2329	0,3751	0,3475	0,2428	0,0044
C2H4	0,1683	0,0745	0,1142	0,1042	0,0762	0

Simulação	Ponto 1	Ponto 2	Ponto 3	Ponto 4	Ponto 5	Ponto 6
C2H6	0,139	0,0602	0,0923	0,0859	0,0612	0
C3H6	0,0093	0,004	0,0062	0,0057	0,0041	0
СЗН8	0,0093	0,0041	0,0063	0,0058	0,0042	0
C6H6	0,1668	0,0723	0,1108	0,1031	0,0734	0
Tar	0	0	0	1,5108	0	0
H-Tar	0	0	0	0	0	0
Base Total Molar						
Ar	0	0	0	0	0	0
H2	35,2079	23,8184	27,9692	28,2728	23,534	10,7312
H2O	24,6121	48,6854	31,91	45,5078	41,5	68,2359
H2S	0,0814	0,0468	0,0698	0,0508	0,0529	0,0215
NH3	0,3188	0,1764	0,2501	0,2126	0,1885	0,0599
NO	0,0069	0,0188	0,0007	0,0019	0,0018	0,0135
NO2	0,0125	0,0078	0	0,0263	0,0007	0,0001
N2	0,0281	0,0336	0,0674	0,0077	0,0737	0,0647
N2O	0	0	0	0	0	0
O2	0	0	0	0	0	0
SO2	0,0311	0,0298	0,0407	0,0221	0,0433	0,0369
СО	15,9964	6,325	16,4653	2,9959	9,6942	2,3656
CO2	22,691	20,4479	22,5454	22,0765	24,456	18,4649
HCN	0,0008	0,0001	0,001	0,0002	0,0003	0
CH4	0,75	0,2932	0,4935	0,4296	0,3273	0,0058
C2H4	0,1197	0,0537	0,0859	0,0737	0,0587	0
C2H6	0,0922	0,0405	0,0648	0,0567	0,044	0
C3H6	0,0044	0,0019	0,0031	0,0027	0,0021	0
C3H8	0,0042	0,0019	0,003	0,0026	0,0021	0
C6H6	0,0426	0,0187	0,0299	0,0262	0,0203	0
Tar	0	0	0	0,2338	0	0
H-Tar	0	0	0	0	0	0
Base Seca Mássica						
Ar	0	0	0	0	0	0
H2	4,5754	4,2028	3,6713	4,8982	3,3524	2,3853
H2O	0	0	0	0	0	0
H2S	0,1788	0,1397	0,1548	0,1488	0,1275	0,0808
NH3	0,3499	0,2629	0,2773	0,3111	0,2269	0,1124

Simulação	Ponto 1	Ponto 2	Ponto 3	Ponto 4	Ponto 5	Ponto 6
NO	0,0133	0,0494	0,0014	0,005	0,0039	0,0448
NO2	0,0371	0,0314	0,0001	0,1039	0,0022	0,0004
N2	0,0507	0,0824	0,123	0,0186	0,1459	0,1998
N2O	0	0	0	0	0	0
O2	0	0	0	0	0	0
SO2	0,1286	0,1673	0,1698	0,1219	0,1959	0,2606
СО	28,8825	15,5062	30,0281	7,2114	19,1868	7,3057
CO2	64,3731	78,7654	64,6035	83,4937	76,0521	89,5999
HCN	0,0014	0,0003	0,0018	0,0005	0,0005	0
CH4	0,7757	0,4118	0,5155	0,5923	0,371	0,0103
C2H4	0,2164	0,1317	0,157	0,1777	0,1164	0
C2H6	0,1787	0,1065	0,1269	0,1464	0,0935	0
С3Н6	0,0119	0,0071	0,0085	0,0098	0,0062	0
С3Н8	0,012	0,0073	0,0087	0,0099	0,0065	0
C6H6	0,2145	0,1278	0,1523	0,1757	0,1122	0
Tar	0	0	0	2,5752	0	0
H-Tar	0	0	0	0	0	0
Base Seca Molar						
Ar	0	0	0	0	0	0
H2	46,7023	46,4165	41,0768	51,8842	40,229	33,784
H2O	0	0	0	0	0	0
H2S	0,108	0,0912	0,1025	0,0932	0,0905	0,0677
NH3	0,4228	0,3437	0,3673	0,3901	0,3223	0,1885
NO	0,0091	0,0367	0,0011	0,0036	0,0032	0,0426
NO2	0,0166	0,0152	0,0001	0,0482	0,0012	0,0002
N2	0,0372	0,0655	0,099	0,0142	0,126	0,2036
N2O	0	0	0	0	0	0
O2	0	0	0	0	0	0
SO2	0,0413	0,0581	0,0598	0,0406	0,074	0,1161
СО	21,2188	12,3258	24,1816	5,4979	16,5713	7,4474
CO2	30,099	39,8482	33,1112	40,5131	41,8051	58,1313
HCN	0,0011	0,0002	0,0015	0,0004	0,0005	0,0001
CH4	0,9949	0,5715	0,7248	0,7884	0,5595	0,0184
C2H4	0,1587	0,1046	0,1262	0,1352	0,1004	0
C2H6	0,1223	0,0788	0,0952	0,104	0,0752	0

Simulação	Ponto 1	Ponto 2	Ponto 3	Ponto 4	Ponto 5	Ponto 6
C3H6	0,0058	0,0038	0,0045	0,005	0,0036	0
C3H8	0,0056	0,0037	0,0045	0,0048	0,0035	0
C6H6	0,0565	0,0364	0,044	0,048	0,0347	0
Tar	0	0	0	0,429	0	0
H-Tar	0	0	0	0	0	0

Simulação	Ponto 7	Ponto 8	Ponto 9	Ponto 10	Ponto 11	Ponto 12
%O2	100	100	100	100	100	100
RE	0,4	0,2	0,3	0,3	0,3	0,3
Vazão de gás - O2 (kg/s)	1,19E-04	8,75E-05	1,03E-04	1,73E-04	1,82E-04	1,82E-04
Vazão de vapor (kg/s)	8,89E-05	2,67E-04	1,78E-04	9,83E-05	1,09E-04	9,83E-05
T gás entrada (K)	673	673	673	673	673	673
T distribuidor (K)	1121,80	949,68	995,78	1233,18	1249,40	1253,16
T interm. leito (K)	1136,34	954,42	1008,47	1248,11	1263,49	1267,37
T final leito (K)	1136,28	954,35	1008,41	1248,05	1263,43	1267,32
T méd. leito gases de entrada (K)	1131,47	952,82	1004,22	1243,11	1258,77	1262,62
Perda de carga na placa (kPa)	0,58	1,04	0,81	0,75	0,81	0,78
Perda de carga na placa (mmH2O)	59,00	106,00	82,00	77,00	83,00	79,00
Perda de carga no leito (kPa)	5,35	5,22	5,23	4,57	4,63	4,60
Perda de carga no leito (mmH2O)	546,00	533,00	534,00	467,00	472,00	469,00
Q volumétrica (m ³ /s)	1,0380E-03	1,3780E-03	1,2880E-03	1,4470E-03	1,5360E-03	1,4920E-03
ρ (kg/m³)	3,5210E-01	3,7140E-01	3,7980E-01	3,2170E-01	3,1630E-01	3,1830E-01
Q mássica (kg/s)	3,6548E-04	5,1179E-04	4,8918E-04	4,6550E-04	4,8584E-04	4,7490E-04
Q mássica cinzas (kg/s)	1,0100E-05	9,8500E-06	1,2630E-05	1,2510E-05	1,2790E-05	1,2710E-05
Cp (J/kg K)	1861,00	2014,00	1981,00	1844,00	1850,00	1837,00
Q mássica CO (kg/s)	3,5680E-03	1,8119E-03	4,9707E-03	3,5792E-03	2,9873E-03	3,1304E-03
Q mássica H2O (kg/s)	1,4147E-02	2,8078E-02	1,9734E-02	1,8561E-02	2,0177E-02	1,9116E-02
Q mássica H2 (kg/s)	4,7545E-04	8,6641E-04	1,1386E-03	3,3833E-04	2,8174E-04	2,8005E-04
Q mássica CH4 (kg/s)	5,1533E-06	9,2378E-05	1,1652E-04	2,4206E-06	1,5547E-06	1,7097E-06
Q mássica CO2(kg/s)	1,8197E-02	2,0067E-02	2,2643E-02	2,3872E-02	2,4936E-02	2,4761E-02
Q mássica alcatrão (kg/s)	0,0000E+00	5,1179E-08	0,0000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
Base Total Mássica						
Ar	0	0	0	0	0	0
H2	1,3009	1,6929	2,3275	0,7268	0,5799	0,5897

Simulação	Ponto 7	Ponto 8	Ponto 9	Ponto 10	Ponto 11	Ponto 12
H2O	38,7068	54,863	40,3409	39,8724	41,5303	40,2525
H2S	0,0539	0,0523	0,0798	0,0327	0,0251	0,0263
NH3	0,0775	0,1058	0,1466	0,0448	0,0335	0,035
NO	0,0002	0,0288	0,0152	0,0002	0,0003	0,0003
NO2	0	0,027	0,008	0	0	0
N2	0,1344	0,0327	0,0689	0,1552	0,1564	0,1632
N2O	0	0	0	0	0	0
O2	0	0	0	0	0	0
SO2	0,16	0,0877	0,1075	0,1918	0,1962	0,1995
СО	9,7625	3,5403	10,1612	7,689	6,1487	6,5916
CO2	49,7895	39,2102	46,2865	51,2818	51,3262	52,1384
HCN	0,0002	0	0,0002	0,0002	0,0001	0,0001
CH4	0,0141	0,1805	0,2382	0,0052	0,0032	0,0036
C2H4	0	0,0612	0,0762	0	0	0
C2H6	0	0,0503	0,0614	0	0	0
C3H6	0	0,0034	0,0041	0	0	0
C3H8	0	0,0034	0,0042	0	0	0
C6H6	0	0,0604	0,0737	0	0	0
Tar	0	0,0001	0	0	0	0
H-Tar	0	0	0	0	0	0
Base Total Molar						
Ar	0	0	0	0	0	0
H2	15,0482	17,0322	23,8296	8,9545	7,2086	7,3885
H2O	50,1062	61,7684	46,2204	54,9747	57,773	56,4392
H2S	0,0369	0,0311	0,0483	0,0238	0,0185	0,0195
NH3	0,1062	0,126	0,1777	0,0653	0,0493	0,0519
NO	0,0002	0,0194	0,0104	0,0002	0,0002	0,0002
NO2	0	0,0119	0,0036	0	0	0
N2	0,1119	0,0237	0,0508	0,1376	0,1399	0,1471
N2O	0	0	0	0	0	0
O2	0	0	0	0	0	0
SO2	0,0582	0,0278	0,0346	0,0744	0,0768	0,0786
СО	8,1282	2,5636	7,4878	6,8184	5,5014	5,9443
CO2	26,3834	18,0706	21,7085	28,9429	29,2272	29,9249
HCN	0,0002	0	0,0002	0,0001	0,0001	0,0001

Simulação	Ponto 7	Ponto 8	Ponto 9	Ponto 10	Ponto 11	Ponto 12
CH4	0,0205	0,2281	0,3065	0,0081	0,0051	0,0056
C2H4	0	0,0442	0,0561	0	0	0
C2H6	0	0,0339	0,0421	0	0	0
C3H6	0	0,0016	0,002	0	0	0
СЗН8	0	0,0016	0,002	0	0	0
C6H6	0	0,0157	0,0195	0	0	0
Tar	0	0	0	0	0	0
H-Tar	0	0	0	0	0	0
Base Seca Mássica						
Ar	0	0	0	0	0	0
H2	2,1224	3,7506	3,9013	1,2087	0,9918	0,987
H2O	0	0	0	0	0	0
H2S	0,088	0,1159	0,1337	0,0544	0,043	0,044
NH3	0,1265	0,2344	0,2457	0,0744	0,0573	0,0586
NO	0,0003	0,0637	0,0255	0,0004	0,0005	0,0005
NO2	0	0,0599	0,0133	0	0	0
N2	0,2192	0,0724	0,1155	0,2581	0,2675	0,2731
N2O	0	0	0	0	0	0
O2	0	0	0	0	0	0
SO2	0,261	0,1942	0,1801	0,319	0,3356	0,3338
СО	15,9276	7,8434	17,0321	12,7877	10,5161	11,0324
CO2	81,2317	86,8694	77,5849	85,2883	87,7827	87,2646
HCN	0,0003	0,0001	0,0004	0,0003	0,0002	0,0002
CH4	0,023	0,3998	0,3993	0,0087	0,0055	0,0059
C2H4	0	0,1356	0,1278	0	0	0
C2H6	0	0,1115	0,1029	0	0	0
C3H6	0	0,0074	0,0069	0	0	0
C3H8	0	0,0075	0,0071	0	0	0
C6H6	0	0,1338	0,1235	0	0	0
Tar	0	0,0003	0	0	0	0
H-Tar	0	0	0	0	0	0
Base Seca Molar						
Ar	0	0	0	0	0	0
H2	30,1605	44,55	44,3097	19,8877	17,0712	16,9614
H2O	0	0	0	0	0	0

Simulação	Ponto 7	Ponto 8	Ponto 9	Ponto 10	Ponto 11	Ponto 12
H2S	0,074	0,0814	0,0898	0,0529	0,0438	0,0447
NH3	0,2128	0,3295	0,3304	0,145	0,1167	0,1191
NO	0,0003	0,0508	0,0194	0,0005	0,0006	0,0005
NO2	0	0,0312	0,0066	0	0	0
N2	0,2242	0,0619	0,0944	0,3056	0,3313	0,3377
N2O	0	0	0	0	0	0
O2	0	0	0	0	0	0
SO2	0,1167	0,0726	0,0644	0,1652	0,1818	0,1805
СО	16,2909	6,7054	13,9232	15,1435	13,0281	13,646
CO2	52,8791	47,2663	40,3656	64,2814	69,2145	68,6968
HCN	0,0004	0,0001	0,0003	0,0003	0,0002	0,0002
CH4	0,0411	0,5967	0,5699	0,0179	0,012	0,0128
C2H4	0	0,1157	0,1043	0	0	0
C2H6	0	0,0888	0,0784	0	0	0
C3H6	0	0,0042	0,0037	0	0	0
С3Н8	0	0,0041	0,0037	0	0	0
C6H6	0	0,041	0,0362	0	0	0
Tar	0	0,0001	0	0	0	0
H-Tar	0	0	0	0	0	0

Simulação	Ponto 13	Ponto 14	Ponto 15	Ponto 16	Ponto 17
%O2	100	100	100	100	100
RE	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3
Vazão de gás - O2 (kg/s)	1,73E-04	1,73E-04	1,82E-04	1,82E-04	1,73E-04
Vazão de vapor (kg/s)	1,09E-04	9,83E-05	1,09E-04	9,83E-05	1,09E-04
T gás entrada (K)	673	673	673	673	673
T distribuidor (K)	1229,04	1193,21	1227,05	1234,11	1206,82
T interm. leito (K)	1243,64	1210,07	1245,45	1250,93	1225,86
T final leito (K)	1243,59	1209,74	1245,39	1250,87	1225,79
T méd. leito gases de entrada (K)	1238,76	1204,34	1239,30	1245,30	1219,49
Perda de carga na placa (kPa)	0,79	0,72	0,81	0,78	0,78
Perda de carga na placa (mm H2O)	80,00	74,00	82,00	79,00	80,00
Perda de carga no leito (kPa)	4,59	4,55	4,47	4,49	4,53
Perda de carga no leito (mm H2O)	468,00	464,00	456,00	459,00	462,00

Simulação	Ponto 13	Ponto 14	Ponto 15	Ponto 16	Ponto 17
Q volumétrica (m ³ /s)	1,4880E-03	1,5150E-03	1,6180E-03	1,5780E-03	1,5720E-03
ρ (kg/m³)	3,2020E-01	3,3250E-01	3,1930E-01	3,2040E-01	3,2280E-01
Q mássica (kg/s)	4,7646E-04	5,0374E-04	5,1663E-04	5,0559E-04	5,0744E-04
Q mássica cinzas (kg/s)	1,2510E-05	1,5010E-05	1,4250E-05	1,4300E-05	1,4160E-05
Cp (J/kg K)	1856,00	1862,00	1865,00	1854,00	1872,00
Q mássica CO (kg/s)	3,4126E-03	7,3378E-03	5,1940E-03	5,3828E-03	5,6025E-03
Q mássica H2O (kg/s)	1,9613E-02	1,7485E-02	2,0099E-02	1,9081E-02	1,9494E-02
Q mássica H2 (kg/s)	3,4138E-04	7,1294E-04	4,9477E-04	4,8683E-04	5,5849E-04
Q mássica CH4 (kg/s)	2,2394E-06	9,4703E-06	4,4430E-06	4,5503E-06	5,5311E-06
Q mássica CO2(kg/s)	2,4077E-02	2,4591E-02	2,5644E-02	2,5378E-02	2,4859E-02
Q mássica alcatrão (kg/s)	0,0000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
Base Total Mássica					
Ar	0	0	0	0	0
H2	0,7165	1,4153	0,9577	0,9629	1,1006
H2O	41,1641	34,7106	38,9048	37,739	38,4172
H2S	0,0313	0,0651	0,0439	0,0447	0,0502
NH3	0,043	0,0953	0,0629	0,064	0,0727
NO	0,0003	0,0001	0,0001	0,0002	0,0003
NO2	0	0	0	0	0
N2	0,1558	0,1425	0,1488	0,1519	0,1439
N2O	0	0	0	0	0
02	0	0	0	0	0
SO2	0,1887	0,1677	0,1821	0,1859	0,1744
СО	7,1624	14,5668	10,0537	10,6466	11,0406
CO2	50,533	48,8171	49,6372	50,1955	48,9888
HCN	0,0001	0,0006	0,0003	0,0003	0,0003
CH4	0,0047	0,0188	0,0086	0,009	0,0109
C2H4	0	0	0	0	0
C2H6	0	0	0	0	0
СЗН6	0	0	0	0	0
СЗН8	0	0	0	0	0
С6Н6	0	0	0	0	0
Tar	0	0	0	0	0
H-Tar	0	0	0	0	0
Base Total Molar					

Simulação	Ponto 13	Ponto 14	Ponto 15	Ponto 16	Ponto 17
Ar	0	0	0	0	0
H2	8,7609	16,4241	11,488	11,6292	12,9988
H2O	56,3279	45,0754	52,2253	51,0055	50,773
H2S	0,0226	0,0447	0,0311	0,032	0,0351
NH3	0,0622	0,1309	0,0893	0,0915	0,1016
NO	0,0003	0,0001	0,0001	0,0002	0,0002
NO2	0	0	0	0	0
N2	0,1371	0,119	0,1284	0,132	0,1223
N2O	0	0	0	0	0
O2	0	0	0	0	0
SO2	0,0726	0,0612	0,0687	0,0706	0,0648
СО	6,3036	12,1666	8,6802	9,2547	9,3848
CO2	28,3053	25,95	27,2755	27,7702	26,5028
HCN	0,0001	0,0005	0,0003	0,0003	0,0003
CH4	0,0073	0,0275	0,0129	0,0137	0,0162
C2H4	0	0	0	0	0
C2H6	0	0	0	0	0
C3H6	0	0	0	0	0
C3H8	0	0	0	0	0
C6H6	0	0	0	0	0
Tar	0	0	0	0	0
H-Tar	0	0	0	0	0
Base Seca Mássica					
Ar	0	0	0	0	0
H2	1,2177	2,1678	1,5675	1,5465	1,7873
H2O	0	0	0	0	0
H2S	0,0532	0,0998	0,0718	0,0719	0,0816
NH3	0,073	0,146	0,103	0,1028	0,118
NO	0,0006	0,0001	0,0002	0,0003	0,0005
NO2	0	0	0	0	0
N2	0,2648	0,2182	0,2435	0,244	0,2337
N2O	0	0	0	0	0
O2	0	0	0	0	0
SO2	0,3207	0,2569	0,298	0,2986	0,2832
СО	12,1736	22,3111	16,4558	17,1	17,928

Simulação	Ponto 13	Ponto 14	Ponto 15	Ponto 16	Ponto 17
CO2	85,8881	74,7704	81,2456	80,621	79,5495
HCN	0,0002	0,0009	0,0005	0,0005	0,0006
CH4	0,0081	0,0288	0,014	0,0145	0,0177
C2H4	0	0	0	0	0
C2H6	0	0	0	0	0
C3H6	0	0	0	0	0
СЗН8	0	0	0	0	0
C6H6	0	0	0	0	0
Tar	0	0	0	0	0
H-Tar	0	0	0	0	0
Base Seca Molar					
Ar	0	0	0	0	0
H2	20,0607	29,9029	24,0462	23,7358	26,4057
H2O	0	0	0	0	0
H2S	0,0519	0,0814	0,0652	0,0652	0,0713
NH3	0,1424	0,2384	0,187	0,1867	0,2064
NO	0,0006	0,0001	0,0003	0,0003	0,0005
NO2	0	0	0	0	0
N2	0,3139	0,2166	0,2688	0,2695	0,2485
N2O	0	0	0	0	0
O2	0	0	0	0	0
SO2	0,1663	0,1115	0,1439	0,1442	0,1316
СО	14,434	22,1514	18,1691	18,8894	19,0644
CO2	64,8132	47,2466	57,092	56,6803	53,838
HCN	0,0003	0,0009	0,0005	0,0006	0,0006
CH4	0,0167	0,05	0,027	0,028	0,0329
C2H4	0	0	0	0	0
C2H6	0	0	0	0	0
C3H6	0	0	0	0	0
C3H8	0	0	0	0	0
C6H6	0	0	0	0	0
Tar	0	0	0	0	0
H-Tar	0	0	0	0	0

ANOVA; Var.:Delta P; R-sqr=,86278; Adj:,72555 (Analises							
João Paulo - Delta P) 2**(3-0) design; MS Pure Error=,059225							
DV: Delta P							
	SS	df	MS	F	р		
Curvatura.	1,424753	1	1,424753	24,05661	0,001187		
(1)QB	0,068450	1	0,068450	1,15576	0,313698		
(2)QS	0,312050	1	0,312050	5,26889	0,050834		
(3)QO2	0,378450	1	0,378450	6,39004	0,035374		
1 by 2	0,145800	1	0,145800	2,46180	0,155284		
1 by 3	0,000800	1	0,000800	0,01351	0,910340		
2 by 3	0,304200	1	0,304200	5,13634	0,053193		
1*2*3	0,344450	1	0,344450	5,81596	0,042400		
Pure Error	0,473800	8	0,059225				
Total SS	3,452753	16					