



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO TECNOLÓGICO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Felipe Augusto Menon

**Simulação numérica do processo de combustão de cavacos de eucalipto em
fornalha de grelhas reciprocantes**

Florianópolis
2023

Felipe Augusto Menon

**Simulação numérica do processo de combustão de cavacos de eucalipto em
fornalha de grelhas reciprocantes**

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação
em Engenharia Mecânica da Universidade Federal
de Santa Catarina para a obtenção do título de Mes-
tre em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Edson Bazzo, Dr.

Florianópolis
2023

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Menon, Felipe Augusto

Simulação numérica do processo de combustão de cavacos
de eucalipto em fornalha de grelhas reciprocantes / Felipe
Augusto Menon ; orientador, Edson Bazzo, 2023.

82 p.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Santa
Catarina, Centro Tecnológico, Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Mecânica, Florianópolis, 2023.

Inclui referências.

1. Engenharia Mecânica. 2. Combustão. 3. Biomassa. 4.
CFD. 5. Caldeiras. I. Bazzo, Edson. II. Universidade
Federal de Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Mecânica. III. Título.

Felipe Augusto Menon

**Simulação numérica do processo de combustão de cavacos de eucalipto em
fornalha de grelhas reciprocantes**

O presente trabalho em nível de mestrado foi avaliado e aprovado por banca
examinadora composta pelos seguintes membros:

Prof. Edson Bazzo, Dr.
Universidade Federal de Santa Catarina

Prof. Leonel Rincón Cancino, Dr.
Universidade Federal de Santa Catarina

Prof. Lourival Jorge Mendes Neto, Dr.
Universidade Federal de Itajubá

Juan Harold Sosa Arnao, Dr.
Empresa Inka's Boiler

Certificamos que esta é a **versão original e final** do trabalho de conclusão que foi
julgado adequado para obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Coordenação do Programa de
Pós-Graduação

Prof. Edson Bazzo, Dr.
Orientador

Florianópolis, 2023.

Aos meus queridos pais, Antonio e Sandra.

AGRADECIMENTOS

À minha família, cujo apoio e suporte foram essenciais para a realização deste trabalho.

À minha namorada, Paola Ribeiro, pelo incentivo e companheirismo em todos os momentos.

Ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina, pela excelência no ensino.

Ao meu orientador, professor Edson Bazzo, por conduzir com sabedoria o andamento do estudo.

Aos colegas do LabCET, em especial Felipe da Costa Kraus e Moisés Abreu de Sousa, pela cooperação e amizade.

Ao engenheiro Leandro Rogel da Silva, da ICAVI - Indústria de Caldeiras Vale do Itajaí, que colaborou com informações importantes para este trabalho.

À todos que, de alguma maneira, ajudaram na realização desta dissertação.

*“Perderam-se pelo céu azul,
pelas nuvens brancas,
os rolos de fumo do bagaço
queimado nas fornalhas.”
(José Lins do Rego)*

RESUMO

As mudanças climáticas, resultantes do aumento dos gases de efeito estufa na atmosfera, estão impulsionando a adoção de fontes sustentáveis de energia, bem como o desenvolvimento contínuo de processos de conversão mais limpos e eficientes. A biomassa, enquanto fonte renovável baseada em carbono, desempenha um papel significativo no contexto da transição energética. Na indústria, é comum que a conversão da biomassa ocorra por meio da combustão direta em sistemas de grelha. Apesar de serem robustos e amplamente difundidos, esses equipamentos ainda enfrentam uma série de desafios tecnológicos que precisam ser superados. Em âmbito nacional, projetos de pequena e média complexidade são frequentemente desenvolvidos de maneira semiempírica, o que impossibilita a otimização dos processos subjacentes. Com a perspectiva de promover o uso da fluidodinâmica computacional na análise e no projeto de geradores de vapor, este estudo investiga a queima de cavacos de eucalipto no interior de uma câmara de combustão que emprega grelhas reciprocantes. Os objetivos incluem desenvolver um modelo matemático para a combustão de cavacos de madeira em leito móvel, bem como avaliar o processo de queima gasosa na fornalha por meio de uma ferramenta comercial de CFD. Sete espécies químicas foram consideradas, incluindo H_2O , CH_4 , H_2 , CO , CO_2 , O_2 e N_2 . Na primeira fase do estudo, as grelhas foram divididas em zonas ao longo do seu comprimento. Para cada uma das zonas, taxas de secagem, desvolatilização e oxidação do carvão foram prescritas. Através de balanços de massa e energia, determinaram-se a temperatura, a vazão mássica e a concentração de espécies químicas dos gases que deixam o leito em cada região da fornalha. O sistema de equações foi implementado em uma rotina de MATLAB. Em seguida, o processo de combustão gasosa na fornalha foi abordado com o método dos volumes finitos utilizando o *software* Ansys Fluent. Nesta etapa, as condições de contorno foram especificadas com base nos resultados obtidos com o modelo analítico para a conversão do leito de biomassa. Diversas equações de conservação foram resolvidas no domínio de interesse, incluindo a conservação da massa, quantidade de movimento linear, energia e espécies, bem como a conservação de variáveis relacionadas ao modelo de turbulência. Os resultados revelam como se dá a distribuição das principais variáveis do sistema de combustão, como velocidade, temperatura e concentração de espécies químicas, na condição nominal do equipamento. Ao comparar o valor calculado da temperatura média na saída da fornalha com dados experimentais, observou-se uma diferença relativa de 2,1%. Quanto às frações mássicas das espécies químicas na mesma região, a maior diferença percentual entre os valores calculados e os fornecidos pelo fabricante foi de 2,2%. De maneira geral, este estudo contribui para tornar os projetos de sistemas de queima em grelha mais sustentáveis ao delinear uma metodologia ágil para a análise numérica do problema.

Palavras-chave: Combustão. Biomassa. CFD.

ABSTRACT

Climate change, driven by the escalating levels of greenhouse gases in the atmosphere, has led to an increasing demand for sustainable energy sources and the continuous advancement of cleaner and more efficient energy conversion methods. Biomass, being a renewable carbon-based resource, holds a pivotal role in the global energy transition landscape. In industrial settings, biomass conversion predominantly relies on direct combustion in grate systems. However, despite their robustness and widespread use, these systems encounter several technological challenges that require resolution. At the national level, many small and medium-complexity projects are often developed in a semi-empirical manner, hindering the optimization of underlying processes. This study aims to promote the utilization of computational fluid dynamics for the analysis and design of steam generators by investigating the combustion of eucalyptus wood chips within a combustion chamber employing reciprocating grates. The objectives encompass the development of a mathematical model to describe the bed combustion of biomass and the assessment of gas-phase combustion within the furnace using a commercial CFD tool. Seven chemical species, including H_2O , CH_4 , H_2 , CO , CO_2 , O_2 , and N_2 , were considered in the analysis. In the initial phase of the study, the grates were segmented into zones along their length. For each of these zones, drying, devolatilization, and coal oxidation rates were prescribed. Through mass and energy balances, temperature, mass flow rate, and the concentration of chemical species in the gases leaving the bed were determined for each region of the furnace. This equation system was implemented using a MATLAB routine. Subsequently, the gas-phase combustion in the furnace was addressed using the finite volume method with Ansys Fluent software. Boundary conditions were specified based on the results obtained from the analytical model for biomass bed conversion. Various conservation equations, including those for mass, momentum, energy, species concentration, and turbulence-related variables, were solved within the domain of interest. The results unveil the distribution of key parameters within the combustion system, including velocity, temperature, and the concentration of chemical species, under nominal equipment conditions. When comparing the calculated average temperature at the furnace outlet with experimental data, a relative difference of 2.1% was observed. Regarding the mass fractions of chemical species in the same region, the largest percentage difference between the calculated values and those provided by the manufacturer was 2.2%. In summary, this study contributes to enhancing the sustainability of grate burning system projects by presenting an agile methodology for the numerical analysis of the problem.

Keywords: Combustion. Biomass. CFD.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Diferentes estágios da combustão de biomassa.	22
Figura 2 – Acoplamento entre as fases sólida e gasosa em um leito combustível.	23
Figura 3 – Representação de grelhas: a) rotativas; e b) reciprocantes.	24
Figura 4 – Geometria de: a) contracorrente; b) corrente paralela; e c) fluxo cruzado.	25
Figura 5 – Modo de queima quando o combustível é ignitado na superfícies: a) do leito; e b) das grelhas.	26
Figura 6 – Mecanismos de desvolatilização: a) reação única; e b) reações em paralelo.	27
Figura 7 – Ilustração de malhas centradas: a) no vértice; e b) nas células.	30
Figura 8 – Método do cálculo de equilíbrio.	32
Figura 9 – Modelo numérico independente.	34
Figura 10 – Abordagem de <i>walking-column</i>	35
Figura 11 – Método dos elementos discretos.	37
Figura 12 – Unidade geradora de vapor estudada.	39
Figura 13 – Esquema construtivo das paredes d'água.	40
Figura 14 – Esquema construtivo da região protegida com tijolos refratários.	40
Figura 15 – Especificação das zonas de conversão da biomassa.	42
Figura 16 – Distribuição do ar primário e das taxas de conversão da biomassa ao longo do comprimento das grelhas.	43
Figura 17 – Modelo geométrico da câmara de combustão.	53
Figura 18 – Malha para o domínio fluido.	54
Figura 19 – Condições de contorno para a entrada de gases voláteis: a) vazão mássica e temperatura; b) frações mássicas.	55
Figura 20 – Representação esquemática das duas regiões das paredes d'água: a) sem refratários; e b) com refratários.	56
Figura 21 – Renderização volumétrica da velocidade.	58
Figura 22 – Isosuperfície para velocidades iguais a 10 m/s.	59
Figura 23 – Linhas de corrente.	60
Figura 24 – Contornos de velocidade na saída da fornalha.	60
Figura 25 – Renderização volumétrica da temperatura.	61
Figura 26 – Isosurperfícies para temperaturas iguais a a) 1000 °C, b) 1200 °C e c) 1500 °C.	61
Figura 27 – Distribuição de temperatura na superfície dos tijolos refratários.	62
Figura 28 – Renderização volumétrica da fração mássica de H_2O	63
Figura 29 – Renderização volumétrica da fração mássica de CH_4	64
Figura 30 – Renderização volumétrica da fração mássica de H_2	64

Figura 31 – Renderização volumétrica da fração mássica de O_2	65
Figura 32 – Renderização volumétrica da fração mássica de CO	66
Figura 33 – Renderização volumétrica da fração mássica de CO_2	66
Figura 34 – Renderização volumétrica da fração mássica de N_2	67

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Composição polimérica de diferentes biomassas.	20
Tabela 2 – Análise imediata, em base úmida, de diferentes biomassas.	20
Tabela 3 – Análise elementar, em base seca sem cinzas, de diferentes biomassas.	20
Tabela 4 – Poder calorífico superior de diferentes biomassas.	21
Tabela 5 – Parâmetros cinéticos para a desvolatilização da madeira.	28
Tabela 6 – Reações de gaseificação do carvão.	29
Tabela 7 – Coeficientes para a equação de transporte genérica.	29
Tabela 8 – Subprocessos e equações de conservação incluídas no modelo de leito em estudos selecionados.	36
Tabela 9 – Modelos utilizados para a combustão da fase gasosa no bordo livre em estudos selecionados. ⁽¹⁾	38
Tabela 10 – Frações mássicas dos gases que constituem a matéria volátil. . . .	45
Tabela 11 – Parâmetros cinéticos para as reações gasosas.	50
Tabela 12 – Características geométricas da malha numérica.	54
Tabela 13 – Propriedades físicas dos tubos e tijolos refratários.	56
Tabela 14 – Frações mássicas na região de saída da fornalha: comparação entre simulação e valores fornecidos pelo fabricante.	68

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

A_p	Área superficial da partícula
CH_4	Metano
CO	Monóxido de carbono
CO_2	Dióxido de carbono
C_p	Calor específico
E_a	Energia de ativação
H_2	Hidrogênio
H_2O	Água
NO_x	Óxidos de nitrogênio
N_2	Nitrogênio
O_2	Oxigênio
Q_{desv}	Calor absorvido durante a desvolatilização dos cavacos de madeira
Q_{evap}	Calor latente de vaporização da água
Q_{oc}	Energia liberada durante a oxidação completa do carbono
Q_{op}	Energia liberada durante a oxidação parcial do carbono
SO_x	Óxidos de enxofre
$Y_{f,u}$	Razão entre a massa de combustível e a massa da mistura reagente
Γ	Coefficiente de difusão
Ω'	Ângulo sólido
Φ	Função de fase
$\bar{\tau}$	Tensor viscoso
$\dot{Q}_{rad,j}$	Taxa líquida de transferência de calor por radiação
$\dot{\omega}_k$	Velocidade da reação
λ	Condutividade térmica
μ	Viscosidade dinâmica
ϕ	Componente a ser transportada
ρ	Densidade
σ	Constante de Stefan-Boltzmann
σ_s	Coefficiente de dispersão
ε	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta
\vec{J}_i	Fluxo de difusão
\vec{g}	Aceleração da gravidade
\vec{s}'	Direção vetorial da dispersão
\vec{s}	Vetor de direção
\vec{v}	Vetor velocidade
$a_{\varepsilon,i}$	Fator de ponderação para o gás cinza fictício
h_f^o	Entalpia de formação no estado padrão de referência

k	Coeficiente de taxa
k_{ef}	Condutividade efetiva
v_i''	Número de moléculas nos produtos
v_i'	Número de moléculas nos reagentes
[I]	Concentração molar
a	Coeficiente de absorção da mistura gasosa
A	Fator pré-exponencial
ar	Ar primário
C	Elemento químico carbono
cb	Combustível
D	Desvolatilização
e	Energia interna por unidade de massa
g	Gás
G	Gaseificação
G	Geração de energia cinética turbulenta
h	Entalpia
H	Elemento químico hidrogênio
i	Espécie química
I	Tensor unitário
I	Intensidade de radiação
j	Zona do leito de biomassa
k	Coeficiente de absorção para o gás cinza fictício
k	Energia cinética turbulenta
M	Massa molar
n	Índice de refração
N	Elemento químico nitrogênio
N	Número de mols
O	Elemento químico oxigênio
p	Pressão estática
P	Produtos
PC	Poder calorífico
r	Reação
R	Reagentes
R	Taxa líquido de produção da espécie química por meio de reações
Ru	Constante universal dos gases
s	Comprimento do caminho
S	Elemento químico enxofre
S	Termo fonte
S	Secagem

t	Tempo
T	Temperatura
V	Volume
vol	Voláteis
Y	Fração mássica

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	17
1.1	OBJETIVOS	18
1.1.1	Objetivo Geral	18
1.1.2	Objetivos Específicos	18
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	19
2.1	FUNDAMENTAÇÃO	19
2.1.1	Biomassa	19
2.1.1.1	Composição	19
2.1.1.2	Poder calorífico	20
2.1.2	Combustão de biomassa	21
2.1.2.1	Queima em grelha	22
2.1.3	Cinética química	26
2.1.3.1	Desvolatilização	27
2.1.3.2	Gaseificação	28
2.1.4	Fluidodinâmica computacional	29
2.1.4.1	Método dos volumes finitos	30
2.2	MODELAGEM COMPUTACIONAL DE CALDEIRAS DE QUEIMA EM GRELHA	31
2.2.1	Modelagem do leito de biomassa	31
2.2.1.1	Método do cálculo de equilíbrio	31
2.2.1.2	Modelo CFD de meio poroso	33
2.2.1.3	Modelo numérico independente	33
2.2.1.4	Método dos elementos discretos	37
2.2.2	Modelagem do bordo livre	37
3	DESCRIÇÃO DA UNIDADE GERADORA DE VAPOR	39
4	MODELAGEM	42
4.1	MODELO MATEMÁTICO DO LEITO DE BIOMASSA	42
4.1.1	Balanco de massa	43
4.1.1.1	Secagem	44
4.1.1.2	Desvolatilização	44
4.1.1.3	Gaseificação	45
4.1.2	Balanco de energia	46
4.2	MODELO MATEMÁTICO DA FASE GASOSA	47
4.2.1	Conservação da massa	47
4.2.2	Conservação da quantidade de movimento linear	47
4.2.3	Conservação da energia	48
4.2.3.1	Radiação	48

4.2.4	Conservação das espécies	49
4.2.4.1	Taxa de reação	49
4.2.5	Turbulência	51
4.2.6	Equação de estado	51
5	SOLUÇÃO	52
5.1	GEOMETRIA DA FORNALHA	52
5.2	DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL	53
5.3	CONDIÇÕES DE CONTORNO PARA O BORDO LIVRE	54
5.4	ESTRATÉGIA DE SOLUÇÃO	56
6	RESULTADOS	58
6.0.1	Campo de velocidade	58
6.0.2	Distribuição de temperatura	60
6.0.3	Distribuição de espécies químicas	62
6.0.4	Confiabilidade do modelo	67
7	CONCLUSÃO	70
7.1	TRABALHOS FUTUROS	71
	REFERÊNCIAS	72
	APÊNDICE A – CÓDIGOS DA PROGRAMAÇÃO EM MATLAB PARA O MODELO DO LEITO DE BIOMASSA	79

1 INTRODUÇÃO

A crescente preocupação com as mudanças climáticas decorrentes do aumento de gases de efeito estufa na atmosfera terrestre tem promovido o estudo e a utilização de fontes sustentáveis para a geração de energia. Atualmente, somos extremamente dependentes de combustíveis fósseis, que representam cerca de 81% de toda a oferta de energia primária no mundo (IEA, 2019).

Nesse contexto, a biomassa pode desempenhar um papel importante na mudança da matriz energética mundial, dado que é o único recurso renovável baseado em carbono com potencial para substituir o carvão mineral em unidades termelétricas (BAIN *et al.*, 1998). O interesse em materiais lignocelulósicos é justificado pelo fato de que há grande paridade entre a emissão de carbono durante a queima e a absorção do mesmo ao longo do processo de crescimento das plantas. Deste modo, a geração de energia representa um risco praticamente nulo em termos de acúmulo de gases de efeito estufa.

O Brasil detém vasto conhecimento técnico-científico na área de silvicultura, que, somado à disponibilidade de terras e condições climáticas favoráveis, possibilitam ao país ocupar uma posição de destaque em relação ao aproveitamento da biomassa enquanto recurso energético. De fato, 6,9% do consumo interno de energia vem unicamente da lenha e do carvão vegetal (EPE, 2020).

Na indústria, é usual que a conversão da biomassa aconteça através da rota da combustão direta em sistemas de queima em grelha, principalmente pela possibilidade de empregar combustíveis sem preparação rigorosa e com elevadas porcentagens de umidade. Essa tecnologia, apesar de amplamente difundida, ainda apresenta espaço para melhorias que garantam eficiência ao processo de queima e maiores vidas úteis aos equipamentos. Como destaca Sosa-Arno (2007), fabricantes nacionais, em sua maioria, desenvolvem geradores de vapor através de métodos semiempíricos, que são limitados para a otimização de projetos. Muitas vezes, é necessário que se importe soluções ou que testes experimentais de custo elevado sejam realizados.

Adversidades nesse sentido podem ser evitadas, ou, ao menos, reduzidas, através do uso de ferramentas de fluidodinâmica computacional. Estas disponibilizam uma série de modelos que podem auxiliar a análise de tópicos pertinentes à conversão de energia e transferência de calor em fornalhas industriais, como a formação de poluentes, deposição de cinzas e degradação material.

Desse modo, com a perspectiva de promover a utilização de CFD na análise e projeto de geradores de vapor, uma simulação numérica foi desenvolvida para caracterizar a combustão de cavacos de madeira no interior de uma fornalha de grelhas recíprocas. A metodologia, apesar de simplificada, pode ser aplicada com rapidez no contexto industrial, fornecendo meios para a solução de diversos problemas.

1.1 OBJETIVOS

Nós tópicos seguintes são descritos os objetivos deste trabalho.

1.1.1 Objetivo Geral

Analisar a queima de cavacos de eucalipto no interior de uma câmara de combustão que emprega grelhas reciprocantes.

1.1.2 Objetivos Específicos

- Desenvolver modelo matemático para a combustão de cavacos de madeira em leito móvel;
- avaliar o processo de combustão gasosa no interior da fornalha utilizando ferramenta de fluidodinâmica computacional;
- analisar a distribuição de espécies químicas na condição de projeto.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo são abordados fundamentos e o estado da arte referente à modelagem computacional da combustão de biomassa em caldeiras de queima em grelha.

2.1 FUNDAMENTAÇÃO

2.1.1 Biomassa

Do ponto de vista energético, a biomassa pode ser entendida como qualquer recurso renovável oriundo de matéria orgânica passível de ser transformado em energia térmica, mecânica ou elétrica. De acordo com a sua origem, é classificada em três grandes grupos: (a) material florestal, que abrange, principalmente, a madeira; (b) vegetais não lenhosos, produzidos a partir de atividades agrícolas; e (c) rejeitos orgânicos, sejam eles urbanos ou industriais (ANEEL, 2008).

2.1.1.1 Composição

A biomassa é formada por uma mistura complexa de materiais orgânicos, como carboidratos, proteínas e gorduras, em conjunto com pequenas quantidades de minerais (sódio, fósforo, cálcio e ferro, principalmente). Em termos macromoleculares, é possível definir a biomassa em função dos constituintes de sua parede celular (celulose, hemicelulose e lignina), extrativos e cinzas.

A celulose, descrita pela fórmula genérica $(C_6H_{10}O_5)_n$, é o principal componente estrutural da biomassa, apresentando-se como um polímero de cadeia linear com comprimento suficiente para resistir à dissolução em água. A hemicelulose, $(C_5H_8O_4)_n$, é outra constituinte associada às paredes celulares de uma planta, que, ao contrário da celulose, apresenta uma estrutura aleatória e amorfa de pouca resistência. Por fim, a lignina, formada predominantemente por anéis aromáticos, atua como um agente cementador nas fibras vegetais.

Durante a combustão da biomassa, a celulose e a hemicelulose são as principais fontes de matéria volátil, enquanto a lignina tem maior contribuição para a matriz carbonosa (BASU, 2013). As composições típicas de celulose, hemicelulose e lignina para diferentes materiais são apresentadas na Tabela 1.

Tabela 1 – Composição polimérica de diferentes biomassas.

Biomassa	Celulose (%)	Hemicelulose (%)	Lignina (%)
Madeira	35—50	20—30	25—30
Palha de trigo	33—40	20—25	15—20
Bagaço de cana	19—24	32—48	23—32
Palha de milho	28	35	16—21
Espiga de milho	50	31	15
Palha de arroz	32	24	18

Fonte: Jahirul *et al.* (2012).

A caracterização da biomassa também pode ocorrer por meio da análise imediata, que a define em termos de componentes brutos como umidade, matéria volátil, carbono fixo e cinzas. É válido observar, conforme apresentado pela Tabela 2, que as biomassas possuem uma quantidade muito maior de voláteis que de carbono fixo.

Tabela 2 – Análise imediata, em base úmida, de diferentes biomassas.

Biomassa	Voláteis (%)	Carbono fixo (%)	Cinzas (%)
Madeira	82,0	17,0	1,0
Palha de trigo	70,2	25,0	4,8
Bagaço de cana	76,9	17,8	5,3
Espiga de milho	80,2	16,7	3,1
Palha de cana	82,3	10,1	7,6

Fonte: Cereijo (2014).

Finalmente, em uma abordagem elementar, pode-se determinar as frações mássicas dos componentes orgânicos da biomassa (carbono, hidrogênio, oxigênio, nitrogênio e enxofre), como mostra a Tabela 3.

Tabela 3 – Análise elementar, em base seca sem cinzas, de diferentes biomassas.

Biomassa	C (%)	H (%)	O (%)	N (%)	S (%)
Madeira	52,1	6,4	41,4	0,0	0,1
Palha de trigo	48,5	6,5	44,1	0,7	0,2
Bagaço de cana	50,3	6,3	43,0	0,3	0,1
Espiga de milho	49,0	6,0	44,6	0,3	0,1
Palha de cana	42,5	6,0	50,6	0,6	0,3

Fonte: Cereijo (2014).

2.1.1.2 Poder calorífico

O poder calorífico de um combustível representa a quantidade de energia liberada na reação de combustão estequiométrica, completa, expressa por unidade de massa de combustível. Matematicamente,

$$PC = \frac{1}{Y_{f,u}} \left[\left(\sum_{i=1}^N Y_i \cdot h_{f,i}^o \right)_R - \left(\sum_{i=1}^N Y_i \cdot h_{f,i}^o \right)_P \right] \quad (1)$$

onde $Y_{f,u}$ é a razão entre a massa de combustível e a massa da mistura reagente, Y_i e h_f^o representam a fração mássica e a entalpia de formação no estado padrão de referência da espécie química i e os subíndices R e P denotam reagentes e produtos, respectivamente.

Para combustíveis que contêm hidrogênio, há a formação de água durante a reação de combustão. Nesses casos, o poder calorífico é classificado em superior (PCS) ou inferior (PCI), dependendo se a água é assumida como líquida ou gasosa nos produtos de combustão. A Tabela 4 apresenta valores aproximados do poder calorífico superior para diferentes materiais lignocelulósicos.

Tabela 4 – Poder calorífico superior de diferentes biomassas.

Biomassa	PCS (MJ/kg)
Pinheiro	20,3
Mogno	20,0
Eucalipto	19,5
Casca de arroz	15,6
Bagaço de cana	15,4
Palha de milho	14,9

Fonte: Quirino *et al.* (2005).

2.1.2 Combustão de biomassa

O aproveitamento da biomassa enquanto recurso energético pode ocorrer por meio de várias rotas tecnológicas: através da combustão direta, de processos termoquímicos (gaseificação, pirólise, liquefação e transesterificação) ou de processos biológicos (digestão anaeróbica e fermentação). Destas, a combustão direta ainda é a maneira mais utilizada para a conversão do material (JONES *et al.*, 2014).

De maneira geral, o processo de combustão da biomassa pode ser dividido em quatro diferentes etapas: secagem, desvolatilização, gaseificação do material carbonoso e combustão da fase gasosa. A secagem ocorre logo após o aquecimento da biomassa, começando quando a temperatura superficial do combustível atinge a temperatura de saturação da água à pressão do ambiente. A taxa de evaporação da umidade contida na partícula de biomassa depende, principalmente, da temperatura local, da concentração de vapor de água no gás circundante e da taxa de transferência de calor entre o combustível sólido e o meio (RAZMJOO, 2018).

Na sequência, ao passo que sua temperatura aumenta, a biomassa libera uma série de gases, iniciando o processo chamado de desvolatilização. Os produtos de-

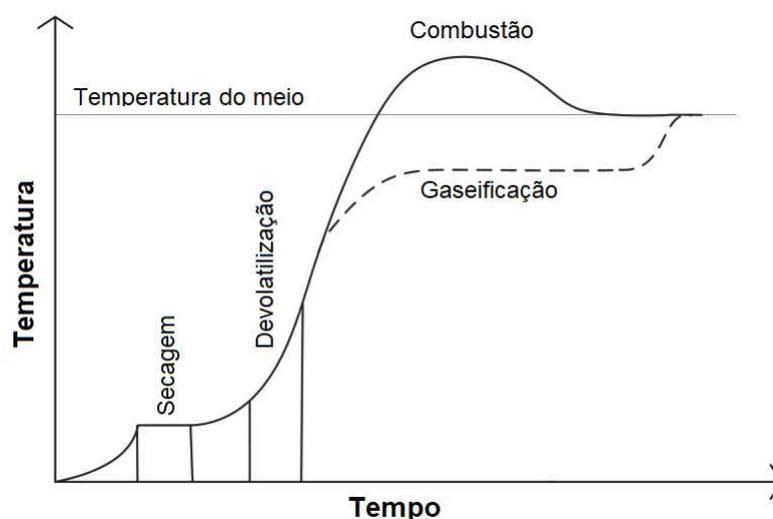
correntes desse fenômeno são categorizados em três grandes grupos: gases leves (basicamente, CO, CO₂, CH₄, H₂ e H₂O), alcatrão (componentes orgânicos na forma de líquido ou gases condensáveis) e o carbono fixo.

Após a desvolatilização, o *char* remanescente sofre uma série de reações heterogêneas de oxidação e gaseificação, das quais os principais produtos são CO, CO₂ e H₂ (KARIM; NASER, 2018a). Essas reações são exotérmicas e fornecem o calor necessário para sustentar o processo de queima do carbono fixo. É válido mencionar, ainda, que a duração do processo de gaseificação é muito maior que as das fases de secagem e desvolatilização.

Por fim, a combustão dos produtos decorrentes das várias etapas descritas ocorre na fase gasosa. A chama de voláteis é essencial para promover a ignição, secagem e desvolatilização da biomassa (RAZMJOO, 2018).

Os diferentes estágios do processo de combustão são apresentados na Figura 1. No final, apenas a fração não-combustível de cinzas deve restar.

Figura 1 – Diferentes estágios da combustão de biomassa.



Fonte: Adaptado de Razmjoo (2018).

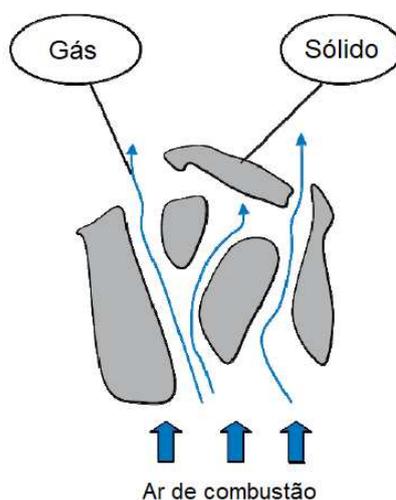
2.1.2.1 Queima em grelha

A queima em leito sobre grelhas continua sendo a tecnologia mais utilizada para a conversão de biomassa em calor. Nesse sistema, o ar primário de combustão é fornecido por baixo das grelhas, enquanto o ar secundário é fornecido pela parte superior do leito de combustível.

O ar primário, normalmente pré-aquecido, avança verticalmente pelo leito, promovendo reações químicas e interagindo com as partículas sólidas através da transfe-

rência de calor e de massa. A Figura 2 exemplifica o processo descrito.

Figura 2 – Acoplamento entre as fases sólida e gasosa em um leito combustível.



Fonte: Sabelström (2007).

O ar secundário, injetado na câmara de combustão através de uma série de bicos, tem a função de fornecer oxigênio adicional para garantir a queima completa dos gases provenientes das etapas de desvolatilização da biomassa e gaseificação do carvão; é essencial que se mantenha um nível adequado de turbulência nesse processo, de modo que as caldeiras operem com menores coeficientes de excesso de ar e, conseqüentemente, maiores eficiências térmicas (RAZMJOO, 2018).

Apesar de manejar bem materiais sem preparação rigorosa, o sistema de queima em grelha pode ser altamente não-homogêneo e, devido à mistura inadequada dos reagentes, apresentar níveis elevados de poluentes atmosféricos (VAN LOO; KOPPEJAN, 2008). Atualmente, em decorrência do esforço para projetar sistemas de alimentação que atuem positivamente sobre esse problema, a maioria das grelhas apresentam algum tipo de movimentação, podendo ser agrupadas em três categorias: rotativas, reciprocantes e vibratórias.

As grelhas rotativas são construídas na forma de esteiras lentamente movidas por engrenagens, carregando o combustível ao longo da fornalha. Quando utilizadas com combustíveis homogêneos, como pellets de madeira, as condições de combustão são relativamente uniformes, devido ao fato de que não há movimento relativo entre o leito e as grelhas (DUFFY, 2012).

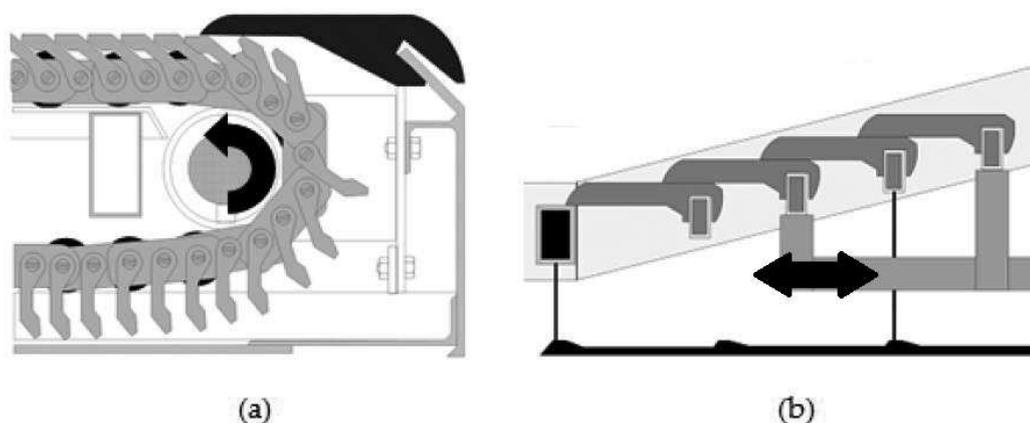
Os sistemas reciprocantes compreendem grelhas fixas e móveis sobrepostas e montadas em formato de escada com inclinação descendente. Nesse caso, o combustível é transportado pela ação de cilindros hidráulicos sobre os quadros que dão

sustentação às grelhas móveis. O movimento oscilatório dos mesmos promove uma melhor mistura dos reagentes no processo de combustão.

Por fim, as grelhas vibratórias são compostas por estruturas inclinadas que vibram com o propósito de uniformizar o leito de combustão. Nelas, o combustível é conduzido, principalmente, pelo efeito da gravidade. Desvantagens desse tipo de construção incluem forte arraste de cinzas e alta emissão de CO (SABELSTRÖM, 2007).

A título de esclarecimento, a Figura 3 traz representações esquemáticas de grelhas rotativas e reciprocantes.

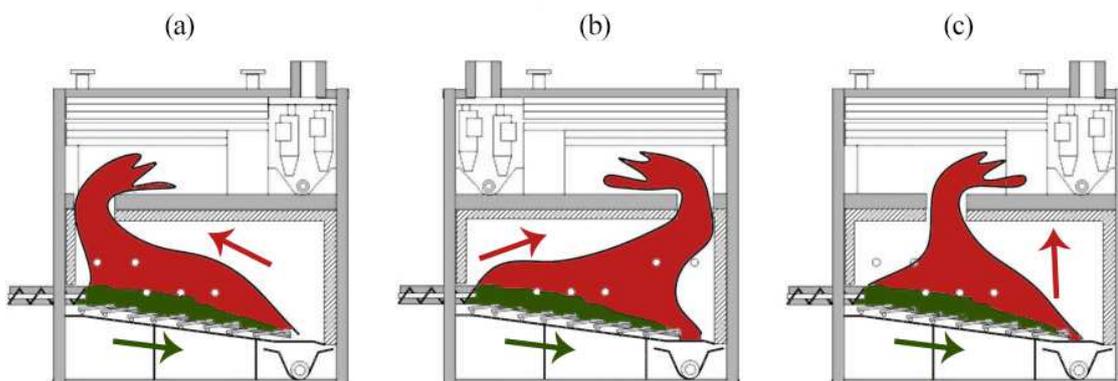
Figura 3 – Representação de grelhas: a) rotativas; e b) reciprocantes.



Fonte: Duffy (2012).

Existem três geometrias distintas baseadas no movimento relativo entre o combustível no interior da fornalha e os gases de combustão no bordo livre, acima do leito de biomassa: (a) de contracorrente, (b) de corrente paralela e (c) de fluxo cruzado. A Figura 4 ilustra as três geometrias mencionadas.

Figura 4 – Geometria de: a) contracorrente; b) corrente paralela; e c) fluxo cruzado.



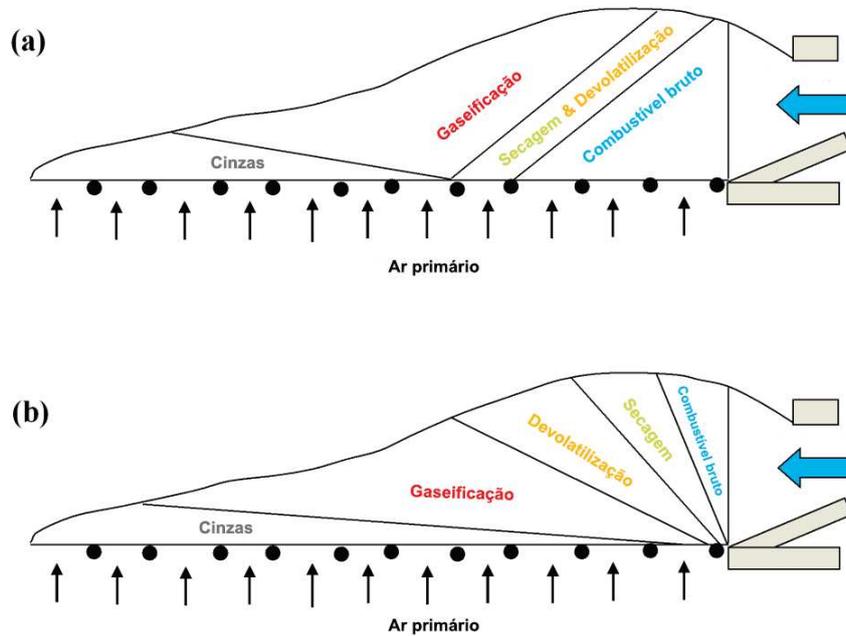
Fonte: Van Loo e Koppejan (2008).

Sistemas de contracorrente são utilizados, principalmente, para combustíveis com alto teor de umidade e baixo poder calorífico. Nesse caso, os gases quentes, que passam logo acima da alimentação de biomassa, ajudam a acelerar o processo de secagem da mesma. Já a geometria de corrente paralela é caracterizada por maiores tempos de residência, sendo normalmente aplicada em combustíveis à base de palha (RAZMJOO, 2018).

Quanto à ignição da biomassa nas câmaras de queima em grelha, é amplamente difundida a ideia, baseada na tese de Rogers (1973), de que ela começa na parte superior do leito, devido à troca de calor por radiação com a chama de voláteis e com as paredes da fornalha. Em seguida, a frente de ignição se propaga para baixo, no sentido contrário ao fluxo de ar primário de combustão, a uma velocidade que depende das condições de operação da fornalha e de características do combustível. Quando a frente de reação alcança a superfície das grelhas, uma frente secundária se propaga para cima, completando a queima da camada remanescente de carvão.

Apesar de muitos estudos empregarem esse modelo, nem sempre o padrão descrito é observado. Em combustíveis com alto teor de umidade, a dificuldade para a frente de ignição se propagar de cima para baixo aumenta e outro modo de combustão pode ser observado (THUNMAN; LECKNER, 2001). Nesse segundo padrão, a ignição do combustível acontece nas proximidades da superfície das grelhas e a frente se propaga para cima, no sentido do fluxo de ar primário. O calor gerado na combustão é transferido para as regiões superiores do leito, principalmente, pelos gases quentes, através de convecção. As representações esquemáticas desses dois modos de combustão em fornalhas de grelhas podem ser visualizadas na Figura 5.

Figura 5 – Modo de queima quando o combustível é ignitado na superfícies: a) do leito; e b) das grelhas.



Fonte: Razmjoo (2018).

2.1.3 Cinética química

A cinética química estuda as taxas de reações e os fatores que as influenciam. Considerando uma reação química elementar,



em que $[I]$ é a concentração molar da espécie química i , v_i' e v_i'' são o número de moléculas de i participando da reação como reagente e produto, respectivamente, e N é o número de espécies químicas presentes na mistura, a taxa na qual a reação prossegue é diretamente proporcional às concentrações molares das espécies químicas reagentes. Nesse caso, a lei de ação de massas expressa que

$$\dot{\omega}_k = k_k \prod_{i=1}^N [I]^{v_i'} = \frac{1}{v_i'' - v_i'} \frac{d[I]}{dt} \quad (3)$$

onde $\dot{\omega}_k$ é a velocidade da reação e k_k é chamado de coeficiente de taxa.

Considerando um modelo de esferas rígidas para reações bimoleculares, o coeficiente de taxa da reação pode ser expresso pela forma empírica de Arrhenius,

$$k_k = A e^{-\frac{E_a}{RuT}} \quad (4)$$

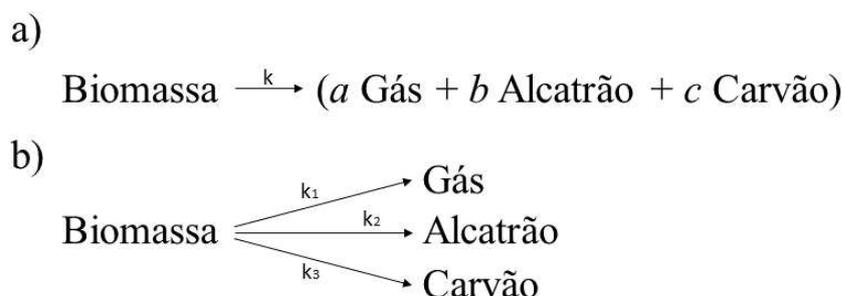
onde A é a constante denominada de fator pré-exponencial, E_a é a energia de ativação, Ru é a constante universal dos gases e T é a temperatura absoluta dos reagentes.

Na expressão acima, o fator pré-exponencial representa a frequência de colisão das moléculas reagentes, enquanto o termo exponencial descreve a fração dessas colisões que tem energia acima de um certo mínimo necessário para que a reação ocorra (TURNS, 2013).

2.1.3.1 Desvolatilização

A cinética química desempenha um papel central no processo de pirólise da biomassa. Nas últimas décadas, muitos estudos foram realizados no sentido de desenvolver modelos cinéticos apropriados para o fenômeno. Enquanto alguns autores modelam a desvolatilização da biomassa através de uma única reação elementar de primeira ordem, outros consideram diversas reações em paralelo para o processo termoquímico, como mostra a Figura 6.

Figura 6 – Mecanismos de desvolatilização: a) reação única; e b) reações em paralelo.



Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

No primeiro caso, o coeficiente de taxa da desvolatilização da biomassa pode ser calculado pela Equação (4), enquanto que no segundo, em que as reações são simultâneas e competitivas, o parâmetro é dado por

$$k = \sum_{i=1}^3 A_i e^{-\frac{(E_a)_i}{RuT}} \quad (5)$$

Para a madeira, Thurner e Mann (1981) apontam os valores das energias de ativação e dos fatores pré-exponenciais das três reações em paralelo, sendo apresentados na Tabela 5.

Tabela 5 – Parâmetros cinéticos para a desvolatilização da madeira.

Reação	E_a (kJ/mol)	A (1/s)
Madeira → Gás	88,6	$1,44 \times 10^4$
Madeira → Alcatrão	112,7	$4,13 \times 10^6$
Madeira → Carvão	106,5	$7,38 \times 10^5$

Fonte: Thurner e Mann (1981).

Apesar de amplamente utilizados, os modelos cinéticos globais apresentam certas limitações, uma vez que consideram apenas as reações primárias e não incluem mecanismos mais elaborados (HAMEED *et al.*, 2019). Isto posto, outros modelos cinéticos foram posteriormente formulados para incluir reações secundárias.

Bradbury *et al.* (1979) propuseram que a celulose era primeiramente convertida em celulose ativa para, só então, ser decomposta em outros produtos secundários. A formação de gases pelo craqueamento do alcatrão e o processo de polimerização de seus componentes orgânicos foram incorporados por Scott *et al.* (1985). Além desses, pode-se destacar o modelo desenvolvido por Ranzi *et al.* (2008), que inclui 15 reações com 30 espécies aglomeradas, o modelo da energia de ativação distribuída e os modelos estruturais, baseados na decomposição dos diferentes grupos funcionais dos materiais carbonosos.

2.1.3.2 Gaseificação

Como a desvolatilização, o processo de gaseificação do carvão é fortemente influenciado pela cinética química. Nessa etapa, o gás circundante se difunde através dos poros do material carbonoso, aumentando consideravelmente a superfície de reação. Nesse sentido, pode-se afirmar que a taxa de consumo do carvão é determinada pelos efeitos combinados da cinética das reações superficiais e da difusão de oxigênio, tanto na fronteira do combustível quanto em seu interior (CEREIJO, 2014). Matematicamente, a velocidade de consumo do carvão pode ser escrita como

$$\dot{\omega}_{ch} = A_p \frac{k_c \cdot k_d}{k_c + k_d} P_{O_2} \quad (6)$$

onde $\dot{\omega}_{ch}$ é a taxa de reação, A_p é a superfície volumétrica do combustível, k_c é o coeficiente de cinética das reações, k_d é o coeficiente de difusão mássica e P_{O_2} é a pressão parcial do oxigênio na fase gasosa.

Além da oxidação direta, parcial ou completa, outras reações de gaseificação são normalmente consideradas para a determinação do coeficiente cinético de consumo do carvão. A Tabela 6 apresenta algumas das reações globais mais usuais, bem como seus respectivos parâmetros cinéticos.

Tabela 6 – Reações de gaseificação do carvão.

Reação	Coefficiente de taxa
$C + \varphi O_2 \rightarrow 2(1 - \varphi)CO + (2\varphi - 1)CO_2$	$k_C = 1,72 T e^{\frac{-9000}{T}}$
$C + CO_2 \rightarrow 2CO$	$k_C = 3,42 T e^{\frac{-15600}{T}}$
$C + H_2O \rightarrow CO + H_2$	$k_C = 5,71 T e^{\frac{-15600}{T}}$

Fonte: Karim e Naser (2018a).

2.1.4 Fluidodinâmica computacional

A fluidodinâmica computacional (CFD) pode ser descrita como a área do conhecimento que trata da simulação numérica de escoamentos de fluidos, transferência de calor e fenômenos relacionados, como reações químicas. A maioria dos códigos empregados nesse campo partem de equações que descrevem matematicamente a conservação de determinadas grandezas de interesse. Essas equações, denominadas de equações de transporte, estão genericamente representadas, em forma diferencial, pela seguinte relação:

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t}}_{\text{Transiente}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \vec{V}\phi)}_{\text{Advectivo}} = \underbrace{\nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi)}_{\text{Difusivo}} + \underbrace{S_\phi}_{\text{Fonte}} \quad (7)$$

Na expressão acima, ρ é a densidade, ϕ é a componente a ser transportada, \vec{V} é o vetor velocidade, Γ é o coeficiente de difusão e S_ϕ inclui todos os termos fontes.

Definindo as variáveis ϕ , Γ e S_ϕ de maneira adequada, a Equação (7) pode vir a representar a equação da continuidade, de Navier-Stokes ou de conservação da energia, como mostra a Tabela 7, que aprofunda o vínculo descrito entre as relações matemáticas.

Tabela 7 – Coeficientes para a equação de transporte genérica.

Equação	ϕ	Γ	S_ϕ
Continuidade	1 [-]	0 [kg/(m · s)]	Geração de massa [kg/(m ³ · s)]
Navier-Stokes	v_i [m/s]	μ [kg/(m · s)]	Forças de corpo, $-\nabla p$ [N/m ³]
Energia	h [J/kg]	λ/C_p [kg/(m · s)]	Transferência de calor [J/(m ³ · s)]

Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

Essas expressões são consideradas as equações de governo para qualquer problema físico que envolva o escoamento de fluidos, tornando possível prever os campos de velocidade, temperatura, pressão e concentração em uma variedade de processos. Apesar de amplamente utilizadas, não há, até o momento, solução analítica para as mesmas. Dessa forma, para que resultados práticos sejam obtidos, é necessário que as equações sejam reescritas em forma algébrica através de alguma

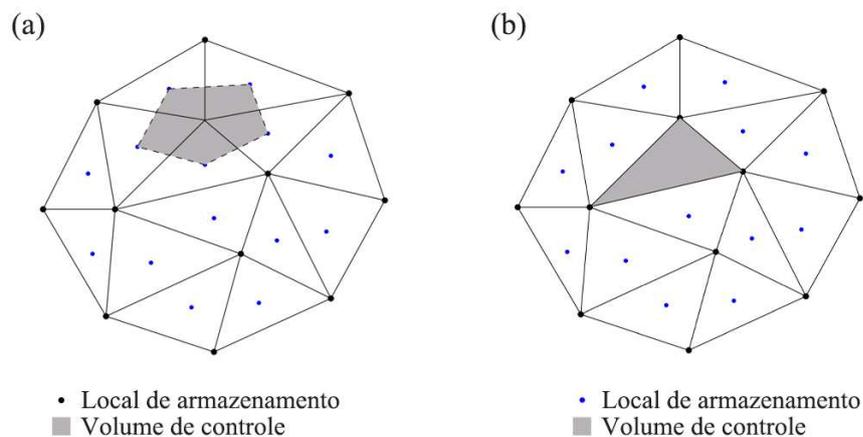
metodologia de discretização, dentre as quais pode-se destacar a dos volumes finitos, das diferenças finitas e dos elementos finitos.

Por traduzir-se em um tratamento matemático com significado físico, onde a conservação de propriedades existe entre cada ponto discreto do domínio, o método dos volumes finitos é o mais empregado em programas comerciais ligados à mecânica dos fluidos e transferência de calor. Sendo assim, seus fundamentos serão rapidamente abordados na subseção a seguir.

2.1.4.1 Método dos volumes finitos

O ponto de partida do método dos volumes finitos é a decomposição do domínio contínuo em um número finito de volumes de controle adjacentes entre si, de forma a estruturar uma malha numérica. Pontos nodais são atribuídos, então, nos vértices dessa malha ou nos centros geométricos dos volumes de controle, onde se alojam as variáveis a serem resolvidas. A Figura 7 ilustra a geração de malhas seguindo o método dos volumes finitos.

Figura 7 – Ilustração de malhas centradas: a) no vértice; e b) nas células.



Fonte: Dutykh (2007).

A partir deste momento, a metodologia consiste na integração das equações de governo sobre cada um dos pequenos volumes de controle que constituem a malha numérica. Neste processo, o teorema de divergência de Gauss é utilizado para converter integrais de volume sobre operadores diferenciais em integrais de superfície (MALISKA, 2017). Para a equação geral de transporte,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V (\rho \phi) dV + \oint_A (\rho \mathbf{V} \phi) dA = \oint_A (\Gamma \nabla \phi) dA + \int_V S_\phi dV. \quad (8)$$

Por fim, as integrais superficiais são representadas através de balanços nas faces dos volumes de controle e as integrais volumétricas são aproximadas em função das variáveis nodais. Matematicamente,

$$V_{cell} \cdot \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \sum_{f=1}^{N_{faces}} \rho_f V_f \phi_f \cdot A_f = \sum_{f=1}^{N_{faces}} \Gamma \nabla \phi_f \cdot A_f + S_\phi \cdot V_{cell}. \quad (9)$$

Dessa forma, um sistema de equações algébricas lineares é obtido, podendo ser resolvido através de métodos segregados ou acoplados. Neste ponto, diversas técnicas têm sido desenvolvidas nos algoritmos de solução, de modo a otimizar o uso de recursos computacionais.

2.2 MODELAGEM COMPUTACIONAL DE CALDEIRAS DE QUEIMA EM GRELHA

Do ponto de vista da modelagem computacional, pode-se dividir as fornalhas de queima em grelha em duas partes: o leito, formado por partículas sólidas de biomassa, e o bordo livre, ou *freeboard*, onde ocorre a queima de combustíveis na fase gasosa.

Ao passo que no bordo livre há, predominantemente, reações homogêneas de oxidação, no interior do leito a combustão da biomassa é consideravelmente mais complexa (RAHDAR *et al.*, 2019). Nessa região, desenvolvem-se simultaneamente interações sólido-sólido (condução e radiação térmica entre partículas), sólido-gás (convecção de calor e transferência de massa através de reações superficiais) e gás-gás (advecção de calor e reações homogêneas de oxidação). À vista disso, é possível afirmar que as maiores distinções entre os trabalhos encontrados na literatura surgem do tratamento do leito de biomassa.

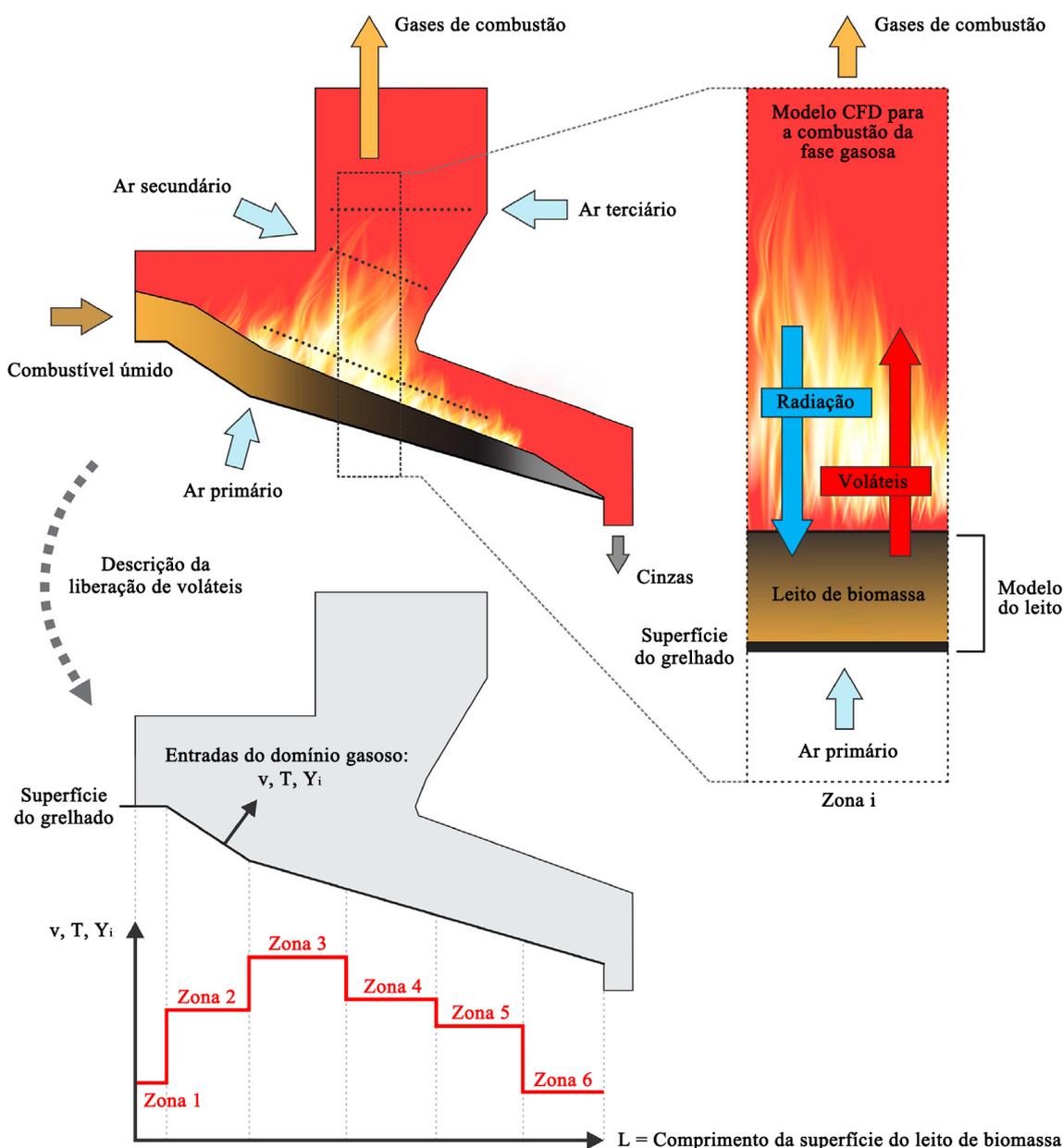
2.2.1 Modelagem do leito de biomassa

A presente subseção é destinada a elucidar com maior profundidade as abordagens utilizadas no domínio do leito.

2.2.1.1 Método do cálculo de equilíbrio

Esta é a abordagem mais recorrente em estudos de simulação, tendo como base a experiência de projetistas e medições em unidades reais. Neste método, a área da grelha é dividida em seções ao longo do seu comprimento, para cada qual taxas de secagem, desvolatilização e oxidação do carvão são prescritas em porcentagem. Através dos balanços globais de massa e energia em cada uma das seções, obtém-se a temperatura, vazão mássica e concentração de espécies químicas dos gases que deixam o leito de biomassa. Essas informações são utilizadas, então, como condições de contorno para a simulação da combustão na fase gasosa. A metodologia é melhor apresentada na Figura 8.

Figura 8 – Método do cálculo de equilíbrio.



Fonte: Zadavec *et al.* (2020).

Os modelos de leito baseados no cálculo de equilíbrio mostraram-se bastante satisfatórios para estudar uma série de problemas em fornalhas industriais. Por exemplo, Petersen (2012), com a finalidade de prever áreas com alto risco de dano corrosivo, utilizou a metodologia na simulação de uma planta termelétrica em operação na Dinamarca. Rajh *et al.* (2016) e Tu *et al.* (2018) seguiram na mesma linha enquanto avaliavam a implementação de sistemas de recirculação de gases de combustão, visando aumento de eficiências térmicas e redução das emissões de NO_x .

Apesar de amplamente utilizado, o método apresenta certas limitações quando

na fase de projeto de uma nova fornalha, já que a presunção das taxas de conversão podem divergir da realidade (JUŘENA, 2012).

2.2.1.2 Modelo CFD de meio poroso

Alguns programas de simulação numérica, como o Ansys Fluent e o OpenFOAM, permitem ao usuário a criação de uma zona porosa no interior do domínio computacional. Quando definida, a região cria resistência ao escoamento de fluidos e gera, conseqüentemente, uma queda de pressão. Dessa maneira, torna-se possível modelar a passagem de gases em um leito de biomassa. Entretanto, para que a abordagem descreva completamente o processo de combustão, vários termos fontes devem ser definidos. As taxas de reações que surgem devido à secagem, desvolatilização e gaseificação do combustível devem ser adicionadas ao meio poroso através das chamadas *User Defined Functions*, ou UDFs.

A abordagem foi demonstrada com sucesso no trabalho de Collazo *et al.* (2012), que apresentaram um modelo tridimensional em regime transiente para a simulação de sistemas de combustão em leito fixo. Na ocasião, os resultados foram validados em laboratório através de um combustor tipo tubo. Posteriormente, M.A. Gómez *et al.* (2014) aprofundaram o modelo para levar em consideração o encolhimento local do leito devido ao colapso de regiões enfraquecidas pela combustão. Ainda, Karim e Naser (2018a) incluíram o movimento do combustível devido à ação de grelhas recíprocas.

Quando comparado ao método do cálculo de equilíbrio, o modelo de meio poroso é mais complexo e requer maiores recursos computacionais, mas, ao contrário do anterior, é capaz de prever o comportamento de uma série de variáveis no interior do leito de biomassa.

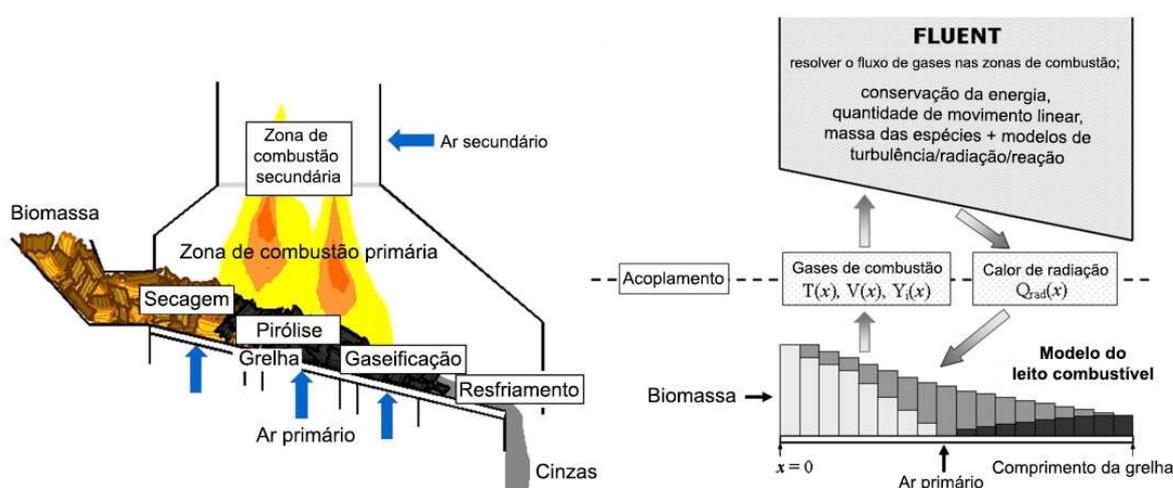
2.2.1.3 Modelo numérico independente

Recentemente, o esforço de pesquisadores tem sido direcionado para o desenvolvimento de modelos numéricos independentes, capazes de descrever em maiores detalhes a combustão do leito de biomassa e todos os processos que ocorrem no interior do mesmo. Basicamente, a metodologia consiste em resolver as equações de conservação da massa, quantidade de movimento linear, energia e espécies químicas para as fases sólida e gasosa, com equações de taxas e correlações empíricas utilizadas para o fechamento dos balanços (YIN *et al.*, 2008). Isso é feito, usualmente, através da implementação de algoritmos em programas de álgebra computacional, como o MATLAB, independentes dos códigos de fluidodinâmica. Dessa maneira, apesar de ser fundamentada nos mesmos princípios dos modelos CFD de meios porosos, a abordagem autônoma apresenta algumas vantagens em relação aos mesmos. Uma vez desenvolvidos, os modelos independentes podem ser utilizados para estudar detalhadamente os processos no interior do leito sem a necessidade de executar toda

a simulação acoplada. Além disso, vários modelos físicos podem ser testados mais facilmente por meio de estudos paramétricos, de modo a aprimorar a metodologia utilizada (JUŘENA, 2012).

A comunicação entre o programa autônomo para a simulação da combustão do leito e o código comercial de CFD, que, nesse caso, maneja apenas as reações gasosas no *freeboard*, pode ser efetuada através de uma única interface, por meio da qual os dois domínios compartilham informações. A Figura 9 representa de modo esquemático a metodologia de simulação.

Figura 9 – Modelo numérico independente.



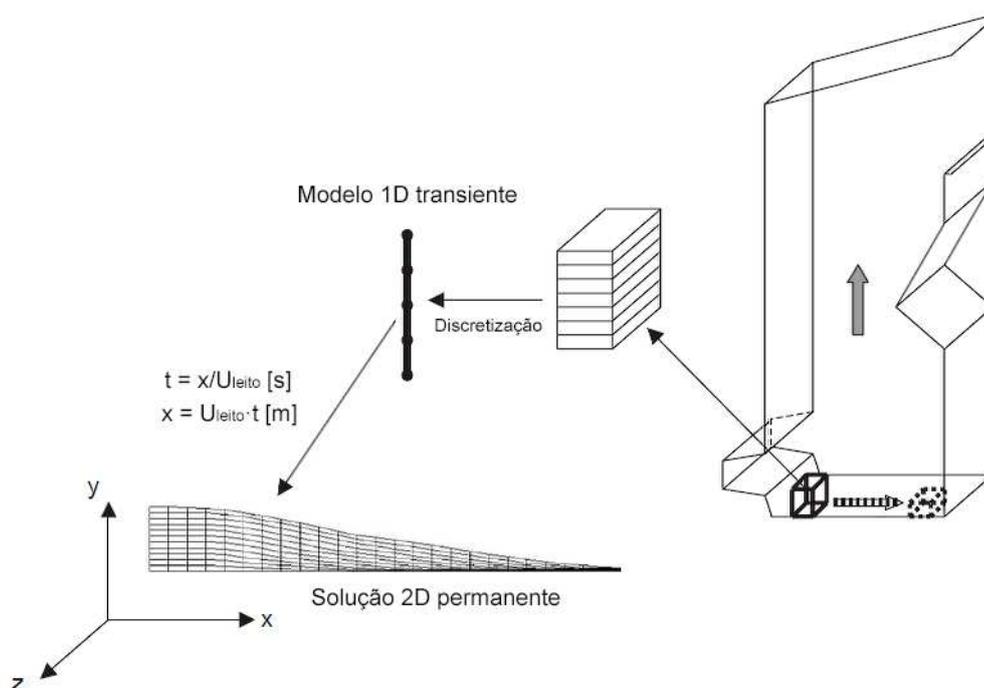
Fonte: Yin *et al.* (2008).

Ao longo dos anos, os modelos independentes de leito foram empregados com sucesso no estudo fenomenológico da combustão de biomassa, bem como na otimização de projetos e solução de problemas práticos vivenciados pela indústria. Dentre os diversos trabalhos desenvolvidos nesse sentido, pode-se citar o de Ryu *et al.* (2001), que propuseram e validaram um modelo unidimensional de meio poroso para descrever a combustão de resíduos urbanos em um incinerador. De maneira similar, Yang *et al.* (2005) estudaram o processo de conversão de combustíveis sólidos em caldeiras de queima em grelha, incorporando às suas simulações um modelo de difusão para levar em consideração o grau de homogeneidade entre as partículas do leito.

Também, Kær (2005) desenvolveu um modelo unidimensional para investigar o comportamento da combustão de palha em grelhas vibratórias. Neste estudo, o autor apresentou o conceito de *walking-column*, muito utilizado na modelagem de leitos móveis, em que o resultado da simulação unidimensional transiente é transposto para uma representação bidimensional em regime permanente, sob a consideração de que o combustível é transportado pela fornalha em velocidade constante, como mostra a Figura 10. Posteriormente, Kær *et al.* (2006) utilizaram este mesmo modelo para

estudar a deposição de cinzas e a sua influência nas taxas de transferência de calor em caldeiras de queima em grelha.

Figura 10 – Abordagem de *walking-column*.



Fonte: Kær (2005).

Por fim, é possível destacar o trabalho de Duffy e Eaton (2016), que, mais recentemente, empregaram um modelo tridimensional em regime transiente para prever a combustão de carvão nas proximidades da superfície de uma grelha, investigando maneiras de reduzir a degradação material experimentada pela mesma.

Apesar da maior atenção despendida recentemente a este tipo de modelagem, podem-se encontrar inconsistências consideráveis no conjunto de equações resolvidas em diferentes estudos. A depender da aplicação considerada, é possível verificar a negligência de termos, diferenças em operadores diferenciais ou até mesmo a inclusão de algumas equações de transporte, como a conservação da quantidade de movimento linear. A Tabela 8 exemplifica essas variações, apresentando os subprocessos e as equações de conservação compreendidas em trabalhos selecionados da literatura.

Tabela 8 – Subprocessos e equações de conservação incluídas no modelo de leito em estudos selecionados.

(continua)			
Ref.	Subprocessos		
	Secagem	Desvolatilização	Gaseificação
Fatehi e Kaviany (1994)		x	x
Ryu <i>et al.</i> (2001)	x	x	x
Yang <i>et al.</i> (2002)	x	x	x
Yang <i>et al.</i> (2005)	x	x	x
Kær <i>et al.</i> (2006)	x	x	x
Ghabi <i>et al.</i> (2008)		x	
Duffy e Eaton (2013)	x	x	x
Rajika e Narayana (2016)	x	x	x
Zhou <i>et al.</i> (2019)	x	x	x

(continuação)				
Ref.	Equações de conservação: fase gasosa			
	Massa	Espécies	Energia	Momento linear
Fatehi e Kaviany (1994)	x	x	x	x
Ryu <i>et al.</i> (2001)	x	x	x	
Yang <i>et al.</i> (2002)	x	x	x	x
Yang <i>et al.</i> (2005)	x	x	x	x
Kær <i>et al.</i> (2006)	x		x	
Ghabi <i>et al.</i> (2008)	x	x	x	x
Duffy e Eaton (2013)	x	x	x	x
Rajika e Narayana (2016)	x	x	x	x
Zhou <i>et al.</i> (2019)	x	x	x	x

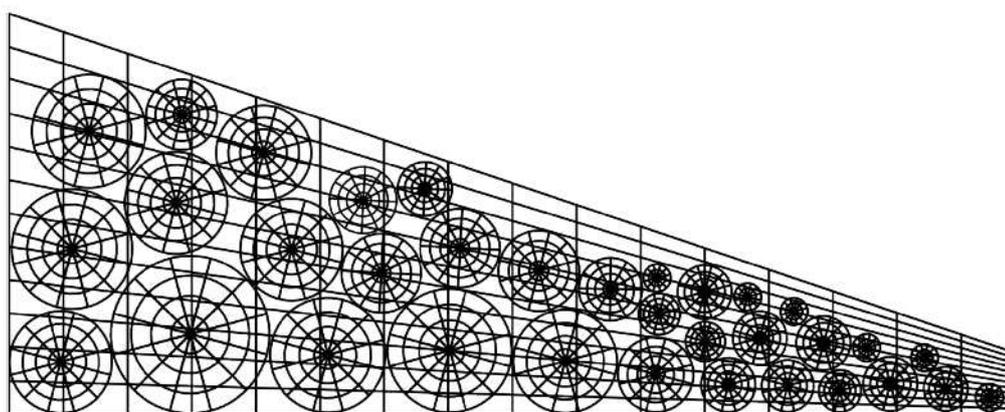
(conclusão)				
Ref.	Equações de conservação: fase sólida			
	Massa	Espécies	Energia	Momento linear
Fatehi e Kaviany (1994)	x		x	
Ryu <i>et al.</i> (2001)	x	x	x	
Yang <i>et al.</i> (2002)	x	x	x	x
Yang <i>et al.</i> (2005)	x	x	x	x
Kær <i>et al.</i> (2006)	x		x	
Ghabi <i>et al.</i> (2008)	x		x	
Duffy e Eaton (2013)			x	
Rajika e Narayana (2016)	x	x	x	
Zhou <i>et al.</i> (2019)	x	x	x	

Fonte: Rahdar *et al.* (2019).

2.2.1.4 Método dos elementos discretos

Nesta abordagem, a fase gasosa do leito é tratada como contínua, enquanto a fase sólida é representada por um número específico de partículas de combustível, cada qual descrita por um modelo de microescala e analisada através de um referencial lagrangiano (JUŘENA, 2012). As duas fases são acopladas através das condições de contorno, como exemplifica a Figura 11.

Figura 11 – Método dos elementos discretos.



Fonte: Juřena (2012).

A metodologia permite avaliar o efeito de interações entre partículas individuais, que não é compreendido nos modelos macroscópicos apresentados anteriormente. Nesse sentido, Sudbrock *et al.* (2011) utilizaram o método dos elementos discretos para estudar a influência de diferentes parâmetros, como a velocidade, o deslocamento e o padrão de movimento das grelhas, no processo de mistura das partículas sólidas. Na mesma linha, Samiei e Peters (2013) analisaram a distribuição dos tempos de residência do material combustível em uma fornalha de ação recíprocante. Posteriormente, Mahmoudi *et al.* (2016) modelaram tanto o comportamento dinâmico quanto a conversão termoquímica das partículas de biomassa em uma caldeira de grelhas móveis, obtendo temperaturas muito próximas daquelas coletadas em uma instalação experimental. Outros trabalhos dessa natureza incluem aqueles desenvolvidos por Somwangthanaroj e Fukuda (2020) e Varela *et al.* (2021).

2.2.2 Modelagem do bordo livre

Ao contrário da combustão no leito de biomassa, que, em função da complexidade de modelagem, ainda possui falta de consenso no meio acadêmico, os processos homogêneos no *freeboard* são bem documentados e incorporados nos diversos programas comerciais de CFD. Atualmente, vários algoritmos podem ser empregados para

abordar os diferentes aspectos da combustão da fase gasosa. A Tabela 9 apresenta alguns dos modelos utilizados por autores com essa proposta.

Tabela 9 – Modelos utilizados para a combustão da fase gasosa no bordo livre em estudos selecionados.⁽¹⁾

Ref.	Turbulência	Interação química-turbulência	Radiação térmica	Coefficiente de absorção da fase gasosa
Dong e Blasiak (2001)	$k - \epsilon$	FR/ED	DTRM	-
Kær (2005)	RNG $k - \epsilon$	FR/ED	DO	WSGGM
Schulze <i>et al.</i> (2011)	Realizable $k - \epsilon$	ED	DO	-
Miguel Gómez <i>et al.</i> (2012)	Realizable $k - \epsilon$	FR/ED	DO	WSGGM
Collazo <i>et al.</i> (2012)	$k - \epsilon$	FR/ED	-	-
M.A. Gómez <i>et al.</i> (2014)	Realizable $k - \epsilon$	FR/ED	DO	WSGGM
Rajh <i>et al.</i> (2016)	Realizable $k - \epsilon$	FR/ED	DO	WSGGM
González <i>et al.</i> (2018)	$k - \epsilon$	-	DO	-
Tu <i>et al.</i> (2018)	$k - \epsilon$	FR/ED	DO	WSGGM
Zhou <i>et al.</i> (2019)	$k - \epsilon$	FR/ED	P1	WSGGM
Zadravec <i>et al.</i> (2020)	Realizable $k - \epsilon$	FR/ED	-	WSGGM
Chapela <i>et al.</i> (2020)	$k - \epsilon$	FR/ED	DO	-
Xia <i>et al.</i> (2020)	RNG $k - \epsilon$	FR/ED	P1	WSGGM

⁽¹⁾Abreviações: FR, finite rate; ED, eddy dissipation; DTRM, discrete transfer radiation method; DO, discrete ordinates; WSGGM, weighted sum of gray gases model.

Fonte: Rahdar *et al.* (2019).

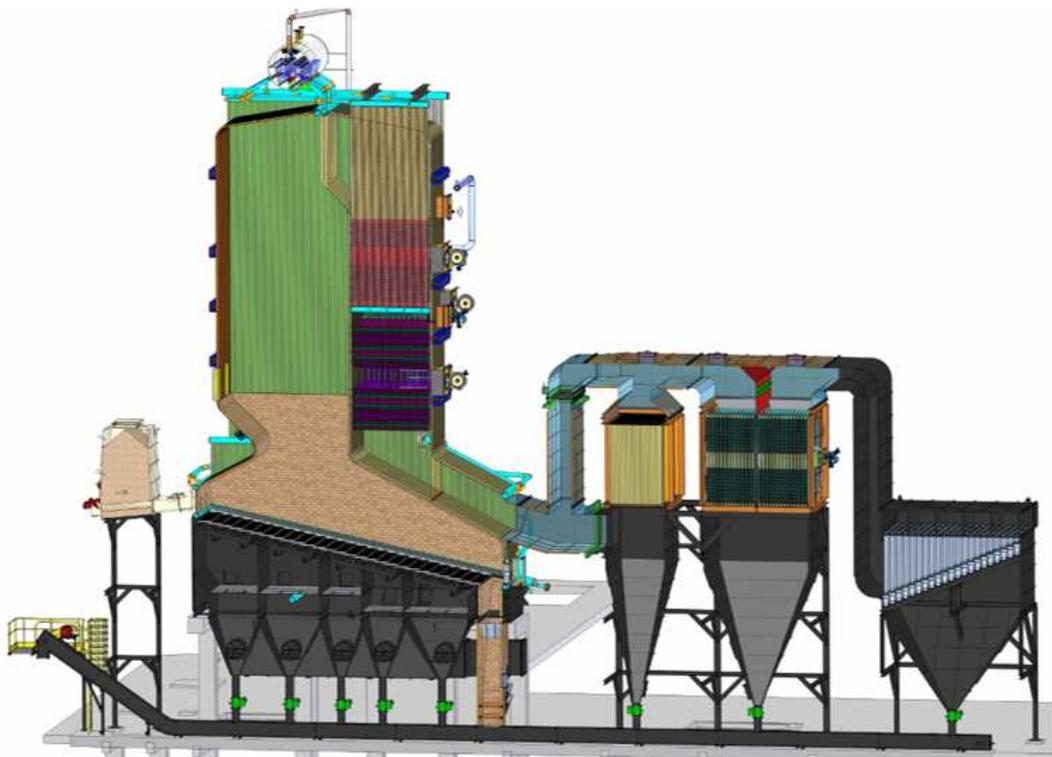
3 DESCRIÇÃO DA UNIDADE GERADORA DE VAPOR

No sentido de garantir uma análise bem fundamentada da queima de cavacos de eucalipto no interior de uma câmara de combustão de grelhas reciprocantes, foram considerados dados operacionais de uma unidade geradora de vapor de fabricação nacional.

Instalada no município de Itaúna, Minas Gerais, a caldeira foi projetada com capacidade para produzir 50 t/h de vapor superaquecido (49 bar, 430 °C), a fim de atender a demanda de uma planta de cogeração de 3 MW.

Conforme ilustrado na Figura 12, a unidade dispõe de um tambor separador conectado às paredes d'água, um economizador, dois evaporadores complementares, dois superaquecedores e um pré-aquecedor de ar, além da fornalha de grelhas reciprocantes, local de interesse do presente trabalho.

Figura 12 – Unidade geradora de vapor estudada.



Fonte: Empresa fabricante.

As paredes d'água são montadas de modo a favorecer o processo de circulação natural da água em ebulição no interior de tubos aletados de pequeno diâmetro, como apresentado na Figura 13.

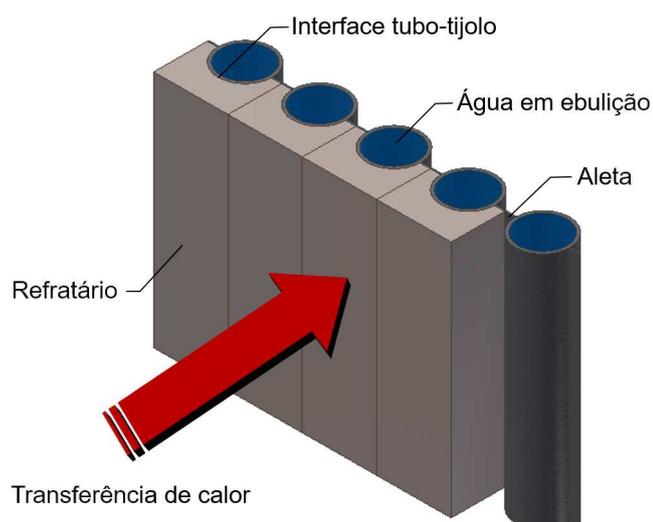
Figura 13 – Esquema construtivo das paredes d'água.



Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

Na parte inferior da fornalha, onde a intensidade da combustão é maior, as paredes d'água são revestidas com tijolos refratários. A Figura 14 ilustra o esquema construtivo desta parte.

Figura 14 – Esquema construtivo da região protegida com tijolos refratários.



Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

Líquido saturado desce continuamente através de tubos localizados externamente ao corpo principal da caldeira (*downcomers*). Ao absorver energia da combus-

tão, uma mistura de líquido e vapor com menor densidade ascende pelas paredes d'água de volta ao tambor separador.

Em condições de projeto, a fornalha queima 16,6 t/h de cavacos de eucalipto contendo cerca de 40% de teor de umidade. Ainda, de acordo com informações do fabricante, nas condições nominais, a caldeira opera com um coeficiente de excesso de ar de 50%. Para isso, são fornecidos 17,9 kg/s de ar primário na temperatura de 183 °C, além de outros 7,7 kg/s de ar secundário na temperatura de 25 °C.

Dezoito entradas de ar secundário são distribuídas pela fornalha a uma altura de aproximadamente 4 m: cinco em cada parede lateral e oito na parede traseira. Todas possuem diâmetro de 50,8 mm.

Informações complementares relativas à operação da planta foram disponibilizadas em relatório técnico referente a estágio realizado na empresa localizada em Itaúna, Minas Gerais (PÉREZ *et al.*, 2023).

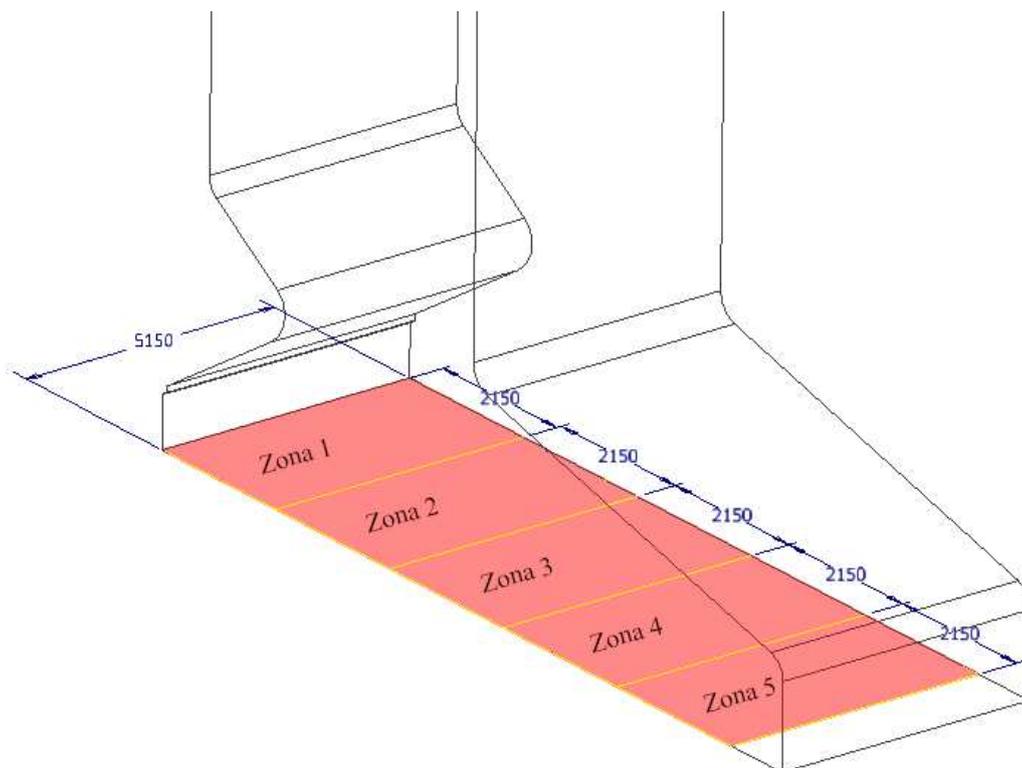
4 MODELAGEM

4.1 MODELO MATEMÁTICO DO LEITO DE BIOMASSA

A conversão do combustível sobre as grelhas é aqui descrita em função da alimentação de biomassa, fluxo radiativo de calor oriundo da chama de voláteis e entrada de ar primário. Com base nesses parâmetros, foi empregado o método do cálculo de equilíbrio, conforme apresentado no Capítulo 2, para determinar os perfis de temperatura, concentração de espécies químicas e velocidade do gás que deixa o leito e adentra o bordo livre. Esta metodologia assegura que quantidades corretas de massa e energia sejam fornecidas à modelagem da fase gasosa.

O leito foi dividido em zonas ao longo da extensão das grelhas, de modo a contemplar as diferentes etapas de conversão da biomassa na câmara de combustão. Cinco zonas de comprimento igual a 2,15 m foram consideradas, como mostra a Figura 15.

Figura 15 – Especificação das zonas de conversão da biomassa.



Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

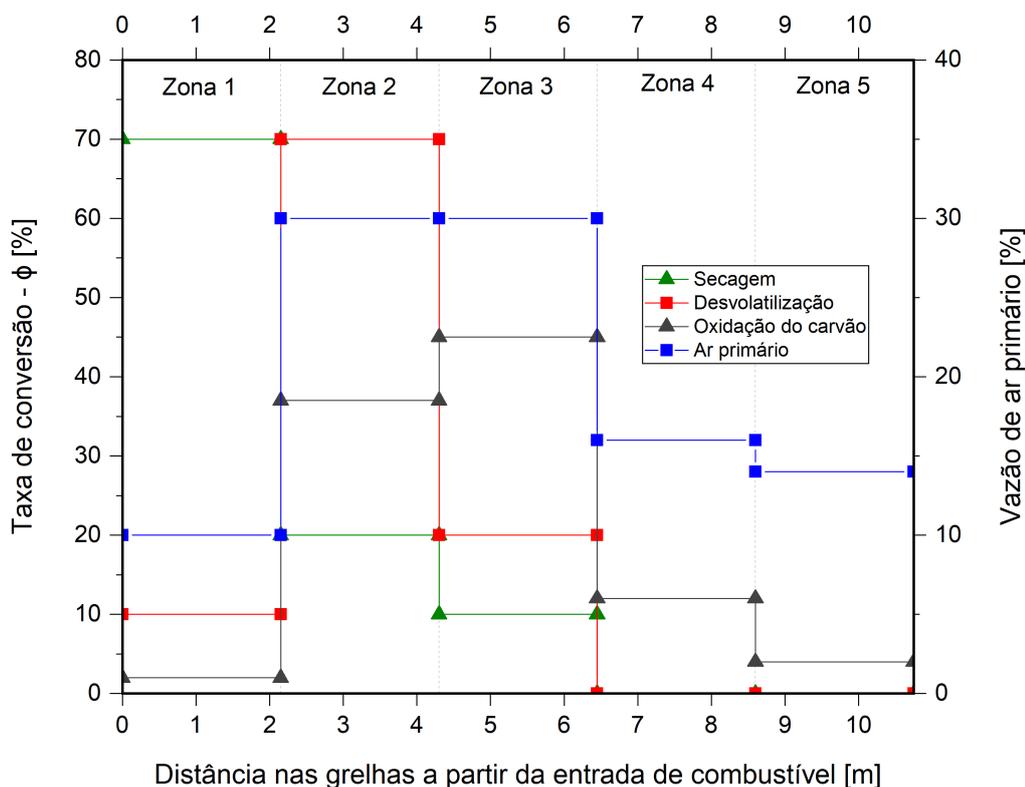
A secagem do combustível ocorre, essencialmente, na entrada da fornalha. Conforme ilustrado pela Figura 16, o processo acontece em grande intensidade na zona 1 (70%), mas também é admitido nas zonas 2 (20%) e 3 (10%).

Estima-se que a desvolatilização da biomassa ocorra de forma mais significativa na zona 2 (70%). Para as zonas 1 e 3 foram prescritas taxas de conversão da ordem de 10% e 20%, respectivamente.

O processo de oxidação do carbono se estende ao longo de todo o comprimento das grelhas, com ênfase na zona 3 (45%). As zonas 1, 2, 4 e 5 respondem por 2%, 37%, 12% e 4%, respectivamente.

Finalmente, em relação à distribuição do ar primário, admitiu-se, com base em informações do fabricante, valores da ordem de 10%, 30%, 30%, 16% e 14% para cada uma das zonas, respectivamente.

Figura 16 – Distribuição do ar primário e das taxas de conversão da biomassa ao longo do comprimento das grelhas.



Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

4.1.1 Balanço de massa

Considerando a natureza do processo de combustão direta de biomassa para aplicação industrial, não há interesse em reações intermediárias, como também não há interesse em análise de emissões (SO_x , NO_x), apenas sete espécies químicas foram

consideradas: H_2O , CH_4 , H_2 , CO , CO_2 , O_2 e N_2 . Fundamentado nesta hipótese, foi estimada a vazão de gás que deixa o leito em cada zona j :

$$\begin{aligned} \dot{m}_{g,j} = & \dot{m}_{H_2O_{S,j}} + \dot{m}_{CH_4_{D,j}} + \dot{m}_{H_2_{D,j}} + \dot{m}_{H_2O_{D,j}} + \dot{m}_{CO_{D,j}} \\ & + \dot{m}_{CO_2_{D,j}} + \dot{m}_{CO_{G,j}} + \dot{m}_{CO_2_{G,j}} + \dot{m}_{O_2,j} + \dot{m}_{N_2,j} \end{aligned} \quad (10)$$

Na Equação (10), as letras subscritas identificam os processos de secagem (S), desvolatilização (D) e gaseificação (G).

A fração em massa de cada componente da mistura foi calculada por

$$Y_{i,j} = \frac{\dot{m}_{i,j}}{\dot{m}_{g,j}} \quad (11)$$

com $i = H_2O$, CH_4 , H_2 , CO , CO_2 , O_2 e N_2 .

4.1.1.1 Secagem

A vazão mássica de água associada ao processo de secagem na j -ésima zona do leito é dada por

$$\dot{m}_{H_2O_{S,j}} = \dot{m}_{cb} \cdot Y_{H_2O,cb} \cdot \varphi_{S,j} \quad (12)$$

onde \dot{m}_{cb} e $Y_{H_2O,cb}$ representam a vazão de alimentação e a fração mássica de umidade no combustível bruto, enquanto $\varphi_{S,j}$ refere-se ao percentual de secagem na região j , de acordo com os valores apresentados na Figura 16.

4.1.1.2 Desvolatilização

O cálculo da vazão mássica de voláteis considera que o material é liberado em sua totalidade para o *freeboard*, isto é, a combustão de gases no interior do leito é negligenciada. Rajh *et al.* (2016) adotaram hipótese similar, apontando os pequenos tempos de residência e, portanto, mistura insuficiente dos voláteis com o oxigênio. Sendo assim, de maneira análoga à Equação (12), a vazão mássica de matéria volátil que parte do leito em cada uma das zonas foi calculada por

$$\dot{m}_{vol_{D,j}} = \dot{m}_{cb} \cdot Y_{vol,cb} \cdot \varphi_{D,j} \quad (13)$$

De acordo com Thunman *et al.* (2001), os gases liberados durante a desvolatilização da madeira podem ser representados de maneira simplificada pela soma de alguns componentes: CO , CO_2 , H_2O , H_2 , CH_4 e C_6H_6 . Para determinar a proporção de cada um desses gases, os autores desenvolveram um modelo semi-empírico que

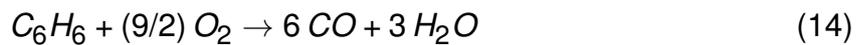
envolve a solução de um sistema de seis equações, compreendendo três balanços de massa elementares, um balanço de energia e duas relações empíricas. Seguindo a metodologia, é possível determinar as frações mássicas dos componentes presentes na matéria volátil, conforme apresentado na Tabela 10.

Tabela 10 – Frações mássicas dos gases que constituem a matéria volátil.

Componente	Fração mássica
CO	0,06556
CO_2	0,2156
H_2O	0,3314
H_2	0,002543
CH_4	0,008681
C_6H_6	0,3762

Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

Como anteriormente apenas sete espécies haviam sido consideradas (ver equação 10), leva-se em conta a contribuição do benzeno através da seguinte reação:



Finalmente, as vazões dos componentes individuais oriundos do processo de desvolatilização são calculadas.

Para $i = CH_4, H_2$ e CO_2 ,

$$\dot{m}_{i,D,j} = Y_i \cdot \dot{m}_{vol,D,j} \quad (15)$$

onde Y_i é a fração mássica da espécie química i na matéria volátil.

Para $i = CO$ e H_2O , deve-se levar em consideração a contribuição do benzeno:

$$\dot{m}_{i,D,j} = Y_i \cdot \dot{m}_{vol,D,j} + Y_{C_6H_6} \cdot N_i \cdot \frac{M_i}{222,1} \cdot \dot{m}_{vol,D,j} \quad (16)$$

onde N_i e M_i são, respectivamente, o número de mols e a massa molar da espécie química i formada na reação do benzeno com o oxigênio. 222,1 corresponde à massa total em gramas.

4.1.1.3 Gaseificação

No interior do leito, o carvão pode ser oxidado de maneira parcial ou completa. Como aponta a literatura técnica, a razão entre a formação de CO e CO_2 pode ser aproximada como função da temperatura do leito. Para valores entre 730 K e 1170 K, Froment *et al.* (2010) propuseram a Equação (17).

$$\frac{CO}{CO_2} = 2500 e^{-\frac{6240}{T}}. \quad (17)$$

Dessa maneira, a liberação de monóxido de carbono proveniente da oxidação do carvão na j -ésima zona do leito é estimada através da Equação (18). Uma expressão análoga para o dióxido de carbono é apresentada pela Equação (19).

$$\dot{m}_{CO_{G,j}} = \dot{m}_{cb} \cdot Y_{C,cb} \cdot \varphi_{G,j} \cdot \frac{28}{12} \cdot \frac{2500 e^{-\frac{6240}{T}}}{1 + 2500 e^{-\frac{6240}{T}}} \quad (18)$$

$$\dot{m}_{CO_2_{G,j}} = \dot{m}_{cb} \cdot Y_{C,cb} \cdot \varphi_{G,j} \cdot \frac{44}{12} \cdot \frac{1}{1 + 2500 e^{-\frac{6240}{T}}} \quad (19)$$

É importante destacar que, nesse caso, T representa a temperatura do leito. Entretanto, de acordo com Yang *et al.* (2002), devido à pequena diferença entre as duas temperaturas, para fins de cálculo, é aceitável que se assuma o valor de temperatura do gás.

Por fim, para completar o balanço de massa, são calculadas as vazões de oxigênio e nitrogênio que deixam o leito sem reagir:

$$\dot{m}_{O_2,j} = \dot{m}_{ar,j} \cdot Y_{O_2,ar} - \frac{16}{28} \cdot \dot{m}_{CO_{G,j}} - \frac{32}{44} \cdot \dot{m}_{CO_2_{G,j}} \quad (20)$$

$$\dot{m}_{N_2,j} = \dot{m}_{ar,j} \cdot Y_{N_2,ar} \quad (21)$$

4.1.2 Balanço de energia

Através do balanço global de energia, foi estimada a temperatura do gás que deixa o leito em cada seção j :

$$T_{g,j} = \frac{1}{\dot{m}_{g,j} \cdot Cp_{g,j}} \cdot \left(\dot{Q}_{rad,j} + \frac{12}{28} \cdot \dot{m}_{CO_{G,j}} \cdot Q_{op} + \frac{12}{44} \cdot \dot{m}_{CO_2_{G,j}} \cdot Q_{oc} \right) - \frac{1}{\dot{m}_{g,j} \cdot Cp_{g,j}} \cdot \left(\dot{m}_{H_2O_{S,j}} \cdot Q_{evap} + \dot{m}_{vol_{D,j}} \cdot Q_{desv} \right) + T_{ar} \quad (22)$$

onde $\dot{Q}_{rad,j}$ representa a taxa líquida de transferência de calor por radiação através da superfície superior do leito, Q_{op} e Q_{oc} referem-se, respectivamente, à energia liberada durante a oxidação parcial e completa do carvão, Q_{evap} é o calor latente de vaporização da água, Q_{desv} representa o calor absorvido durante o processo de desvolatilização dos cavacos de madeira e T_{ar} é a temperatura na qual o ar primário é fornecido à câmara de combustão.

Como $\dot{Q}_{rad,j}$ é dependente da combustão de gases no bordo livre, é necessário que um processo iterativo seja empregado entre os dois domínios da simulação. Para

Q_{op} , Q_{oc} e Q_{evap} atribuíram-se valores de 9208 kJ/kg, 32794 kJ/kg e 2258 kJ/kg, respectivamente. Ainda, de acordo com Tu *et al.* (2018), a energia absorvida pelo combustível durante o processo de liberação de gases voláteis é de cerca de 418 kJ/kg.

Para o cálculo do calor específico da mistura gasosa, sua constituição foi ponderada levando-se em conta as frações mássicas correspondentes,

$$Cp_{g,j} = \sum_i (Y_{i,j} \cdot Cp_{i,j}) \quad (23)$$

onde $i = H_2O, CH_4, H_2, CO, CO_2, O_2$ e N_2 . As expressões para o calor específico das espécies químicas individuais podem ser encontradas no algoritmo de solução, apresentado no Apêndice A.

4.2 MODELO MATEMÁTICO DA FASE GASOSA

Fundamentalmente, a formulação matemática da combustão dos gases no *freeboard* compreende a conservação da massa, conservação da quantidade de movimento linear, conservação da energia e conservação das espécies, além da equação de estado. Equações de conservação relacionadas ao modelo de turbulência também são aqui levadas em consideração. Nas subseções a seguir, o equacionamento é apresentado e alguns modelos são abordados em maior profundidade.

4.2.1 Conservação da massa

A equação de conservação da massa, também denominada de equação da continuidade, é escrita, em sua forma geral, como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (24)$$

onde ρ é a densidade da mistura gasosa e \vec{v} é o campo de velocidade do escoamento.

4.2.2 Conservação da quantidade de movimento linear

O princípio de conservação do *momentum* em um referencial inercial é expresso por

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\bar{\tau}) + \rho \vec{g} \quad (25)$$

em que p é a pressão estática, \vec{g} é a aceleração da gravidade e $\bar{\tau}$ é o tensor viscoso, definido de acordo com a Equação (26).

$$\bar{\tau} = \mu[(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} I] \quad (26)$$

onde μ é a viscosidade molecular e I é o tensor unitário.

4.2.3 Conservação da energia

A conservação da energia é representada através de

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \left(e + \frac{v^2}{2} \right) \right) + \nabla \cdot \left(\rho \vec{v} \left(h + \frac{v^2}{2} \right) \right) = \nabla \cdot (k_{ef} \nabla T - \sum_j h_i \vec{J}_i + \bar{\tau}_{ef} \cdot \vec{v}) + S_h \quad (27)$$

Na expressão acima, e é a energia interna por unidade de massa, h é a entalpia sensível da mistura gasosa, k_{ef} é a condutividade efetiva, que leva em consideração uma componente turbulenta, T é a temperatura local e \vec{J}_i é o fluxo de difusão da espécie i . O termo fonte S_h inclui o calor de reações químicas e de radiação.

4.2.3.1 Radiação

A irradiação de calor é um dos aspectos fundamentais a serem considerados quando da modelagem de fornalhas industriais. No presente estudo, optou-se por utilizar o método das ordenadas discretas, desenvolvido por Chandrasekhar (1960), para estimar a intensidade de radiação (I) ao longo das coordenadas espaciais do domínio gasoso.

No modelo DO, a Equação (28) é resolvida para um número finito de ângulos sólidos discretos, cada qual associado a um vetor de direção \vec{s} fixo no sistema cartesiano global.

$$\nabla \cdot (I(\vec{r}, \vec{s}) \vec{s}) + (a + \sigma_s) I(\vec{r}, \vec{s}) = an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \Phi(\vec{s} \cdot \vec{s}') d\Omega' \quad (28)$$

onde a é o coeficiente de absorção, σ_s é o coeficiente de dispersão, n é o índice de refração, σ é a constante de Stefan-Boltzmann, \vec{s}' é a direção vetorial da dispersão, Φ é a função de fase e Ω' é o ângulo sólido.

O coeficiente de absorção da mistura gasosa foi computado segundo o modelo de soma ponderada dos gases cinzas (WSGGM), em que, para distâncias menores ou iguais a 10^{-4} m,

$$a = \sum_{i=0}^I a_{\varepsilon, i} k_i p \quad (29)$$

e, para distâncias maiores,

$$a = -\frac{\ln(1 - \sum_{i=0}^I a_{\varepsilon,i}(T)(1 - e^{-k_i p s}))}{s} \quad (30)$$

Nas expressões (29) e (30), $a_{\varepsilon,i}$ e k_i são o fator de ponderação e o coeficiente de absorção para o i -ésimo gás cinza fictício, p é a soma das pressões parciais de todos os gases absorventes e s é o comprimento do caminho.

4.2.4 Conservação das espécies

A fim de prever a distribuição das frações mássicas locais, a Equação (31) foi solucionada para diferentes espécies químicas: H_2O , CH_4 , H_2 , CO , CO_2 e O_2 .

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i \quad (31)$$

em que Y_i é a fração mássica da espécie i na mistura gasosa e \vec{J}_i é o fluxo difusivo que surge devido aos gradientes de concentração e temperatura; este parâmetro pode assumir diferentes formas, a depender se o escoamento analisado é laminar ou turbulento. R_i é a taxa líquida de produção da espécie química i por meio de reações.

Como a fração mássica da mistura gasosa deve somar à unidade, a porcentagem de N_2 , espécie mais abundante, foi determinada por diferença, de modo a minimizar erros numéricos.

4.2.4.1 Taxa de reação

Sob algumas condições de combustão, como em chamas difusas de alta temperatura, a turbulência promove, lentamente, a mistura entre o combustível e o oxidante. Estes, por sua vez, quando encontram-se nas zonas de reação, queimam rapidamente. Nesses casos, é razoável negligenciar as taxas cinéticas de Arrhenius e assumir a hipótese de combustão instantânea, apenas limitada pela mistura dos reagentes. O modelo utilizado na presente análise é fundamentado no trabalho de Magnussen e Hjertager (1977), associando o prosseguimento das reações à dissipação de vórtices turbulentos. Portanto, a taxa de produção da espécie química i , de acordo com o modelo Eddy-Dissipation, é dada pelo menor valor resultante das duas expressões a seguir:

$$R_{i,r} = (v''_{i,r} - v'_{i,r}) M_i A \rho \frac{\varepsilon}{k} \min_R \left(\frac{Y_R}{v'_{R,r} M_R} \right) \quad (32)$$

$$R_{i,r} = (v''_{i,r} - v'_{i,r}) M_i A B \rho \frac{\varepsilon}{k} \frac{\sum_P Y_P}{\sum_j^N v''_{j,r} M_j} \quad (33)$$

em que $v''_{i,r}$ e $v'_{i,r}$ são os coeficientes estequiométricos da espécie i nos produtos e reagentes da reação r , M é a massa molar, Y_R é a fração mássica de um reagente R em particular, enquanto Y_P é a fração mássica de qualquer produto P . Finalmente, A e B são constantes empíricas com valores da ordem de 4,0 e 0,5, respectivamente.

Apesar de largamente utilizada na forma padrão, a constante de Magnussen, A , pode ser modificada para que o modelo forneça resultados mais consistentes com determinadas aplicações. Através da medição de temperaturas e concentração de espécies, Scharler *et al.* (2003) calibraram o parâmetro para a simulação da combustão de gases em fornalhas de grelhas. Os autores concluíram que valores na faixa de 0,6 a 1,0 resultaram em distribuições mais condizentes com aquelas observadas *in-situ*, sobretudo para espécies não-intermediárias, como CO_2 e H_2O . À vista disso, a constante A foi aqui tomada como 0,6 para a modelagem da fase gasosa.

Na Equação (32) e Equação (33), a taxa de reação química é governada pela escala de tempo dos turbilhões. Dessa forma, a combustão prossegue sempre que houver turbulência ($k/\varepsilon > 0$), sem a necessidade de uma fonte de ignição ou nível mínimo de energia para que isso ocorra. Essa condição pode levar a temperaturas superestimadas e previsões errôneas para as frações mássicas locais. Uma maneira de remediar o problema é estimar a taxa de reação tanto pela expressão de Arrhenius quanto pelo modelo de dissipação dos vórtices turbulentos, utilizando o menor valor encontrado entre as duas abordagens. Essa metodologia está implementada em alguns programas comerciais sob o nome de *Finite-Rate/Eddy-Dissipation* e foi utilizada no presente estudo.

Três reações globais de oxidação foram consideradas para a simulação do domínio. A Tabela 11 lista as transformações contempladas, bem como os parâmetros cinéticos empregados para determinar suas respectivas taxas de Arrhenius.

Tabela 11 – Parâmetros cinéticos para as reações gasosas.

Reação	Taxa de reação de Arrhenius
$CH_4 + 1,5O_2 \rightarrow CO + 2H_2O$	$k_1 = 5,012 \times 10^{11} e^{\frac{-2,0 \times 10^8}{RT}} \cdot [CH_4]^{0,7} [O_2]^{0,8}$
$H_2 + 0,5O_2 \rightarrow H_2O$	$k_2 = 9,870 \times 10^8 e^{\frac{-3,1 \times 10^7}{RT}} \cdot [H_2][O_2]^{0,5}$
$CO + 0,5O_2 \rightarrow CO_2$	$k_3 = 2,239 \times 10^{12} e^{\frac{-1,7 \times 10^8}{RT}} \cdot [CO][O_2]^{0,25}$

Fonte: Tu *et al.* (2018).

4.2.5 Turbulência

A turbulência da mistura gasosa foi representada com o modelo $k - \varepsilon$ padrão, proposto por Launder e Spalding (1974). Dessa maneira, para obtenção da energia cinética turbulenta e taxa de dissipação, respectivamente k e ε , foram consideradas as equações de transporte correspondentes,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M \quad (34)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \varepsilon u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + G_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (35)$$

De forma resumida, G_k representa a geração de energia cinética turbulenta devido ao efeito de gradientes médios de velocidade, enquanto G_b contabiliza a presença de empuxo. Na Equação (34), Y_M leva em consideração o efeito da dilatação flutuante em escoamentos compressíveis sobre a taxa de dissipação. Na Equação (35), $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$ e $G_{3\varepsilon}$ são constantes. Finalmente, σ_k e σ_ε representam o número de Prandtl turbulento para determinação de k e ε , respectivamente.

Vale destacar que, apesar de se tratar de uma formulação semi-empírica, apoiada tanto em considerações fenomenológicas quanto em empirismo, ela tem sido largamente utilizada para descrever a turbulência em uma série de aplicações, devido à sua robustez e economia computacional.

4.2.6 Equação de estado

Todas as espécies químicas foram tratadas como gases ideais, cuja equação de estado expressa que

$$p V = n R T \quad (36)$$

onde R é a constante universal dos gases.

5 SOLUÇÃO

Conforme comentado anteriormente, o problema da combustão no interior da fornalha foi dividido em dois domínios acoplados, em que os resultados obtidos na solução do leito de biomassa servem como condição de contorno para a solução do bordo livre.

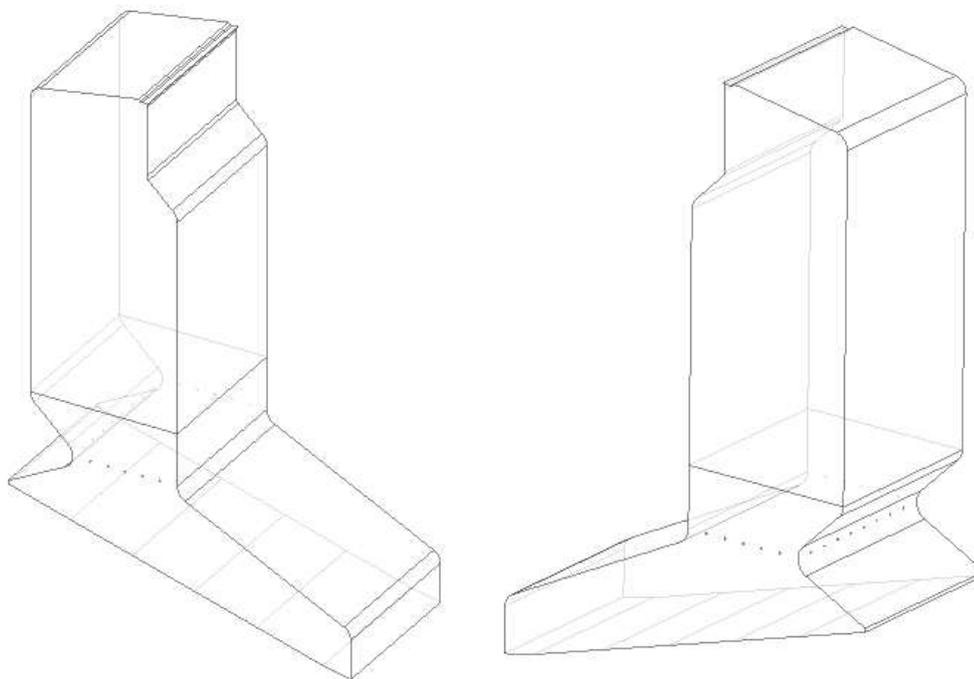
O modelo do leito de biomassa (ver seção 4.1) foi implementado no *software* comercial MATLAB. O algoritmo desenvolvido está integralmente disponível no Apêndice A.

O modelo da fase gasosa no bordo livre (ver seção 4.2) foi resolvido pelo método dos volumes finitos, utilizando o programa Ansys Fluent, considerando-se geometria, malha numérica e condições de contorno descritas a seguir.

5.1 GEOMETRIA DA FORNALHA

Com base em informações obtidas da empresa fabricante, a geometria da câmara de combustão foi reproduzida com o aplicativo Ansys SpaceClaim, como mostra a Figura 17. As paredes d'água foram representadas por meio de uma série de superfícies simplificadas, com o objetivo de reduzir o custo computacional associado à simulação do domínio. O bordo livre corresponde ao volume da fornalha.

Figura 17 – Modelo geométrico da câmara de combustão.

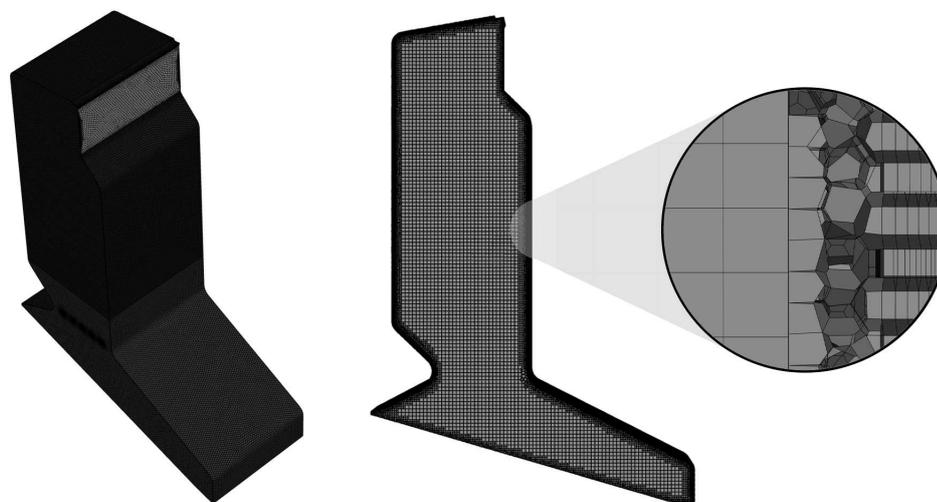


Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

5.2 DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL

O bordo livre foi discretizado por meio do aplicativo de geração de malha disponibilizado pelo Ansys Fluent, empregando-se malha do tipo *Poly-Hexcore*. Dessa forma, a maior parte do domínio foi preenchida com elementos hexaédricos, enquanto elementos poliédricos foram utilizados em áreas de transição. Adicionalmente, foram inseridas camadas prismáticas junto às paredes, com o objetivo de capturar de maneira mais precisa os efeitos de camada limite. O resultado final foi uma malha constituída de 1073116 elementos, conforme representado na Figura 18.

Figura 18 – Malha para o domínio fluido.



Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

Informações relevantes da malha numérica são apresentadas na Tabela 12.

Tabela 12 – Características geométricas da malha numérica.

Informações de volume	
Volume mínimo	7.699502e-10 m ³
Volume máximo	2.160520e-03 m ³
Volume total	4.137201e+02 m ³
Informações de área	
Área mínima	2.582480e-08 m ²
Área máxima	1.638400e-02 m ²
Informações de qualidade	
Qualidade ortogonal mínima	4.97707e-01
Relação de aspecto máxima	4.00468e+01

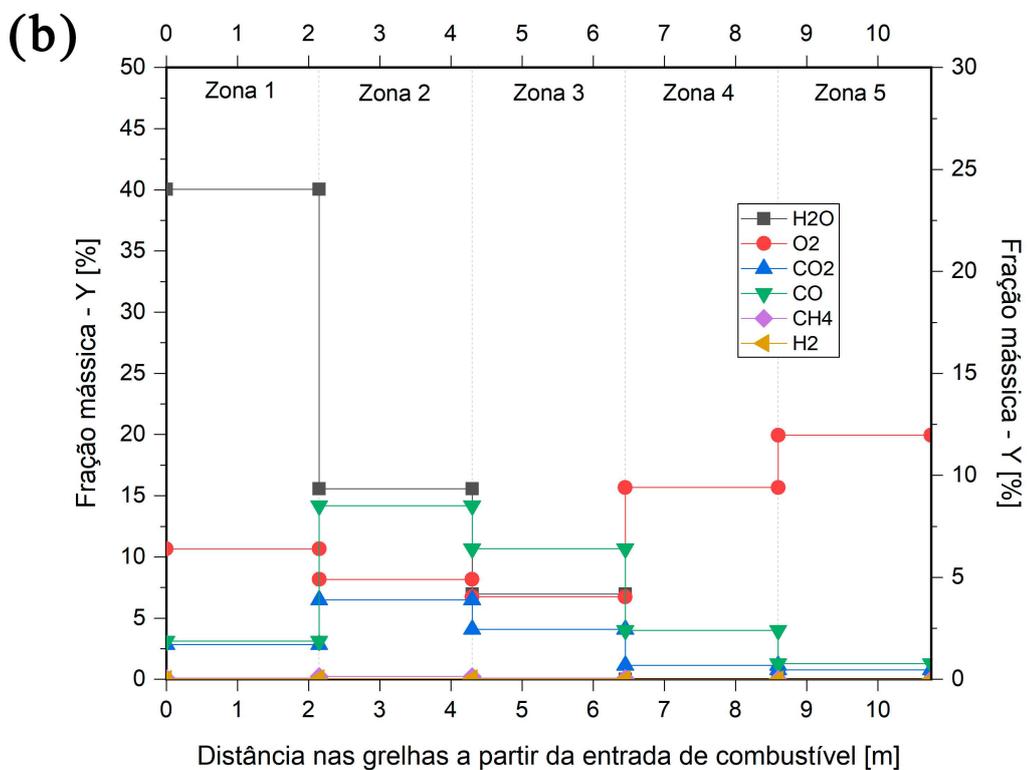
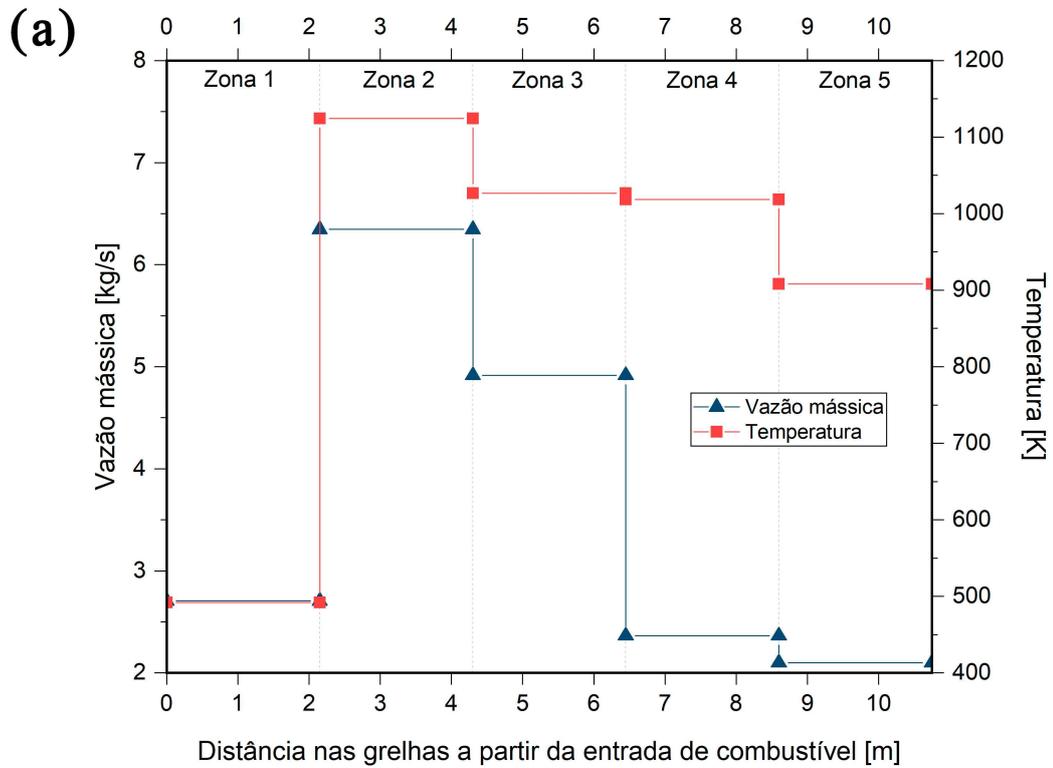
Fonte: Ansys Fluent.

5.3 CONDIÇÕES DE CONTORNO PARA O BORDO LIVRE

São condições de contorno:

- (i) Vazão, temperatura e composição de entrada dos gases voláteis (ver Figura 19);
- (ii) Vazão e temperatura de entrada do ar secundário (0,426 kg/s por bico de injeção, 25 °C);
- (iii) Temperatura prescrita nas paredes d'água (287 °C);
- (iv) Pressão estática no topo da câmara de combustão (-75 mmH₂O).

Figura 19 – Condições de contorno para a entrada de gases voláteis: a) vazão mássica e temperatura; b) frações mássicas.

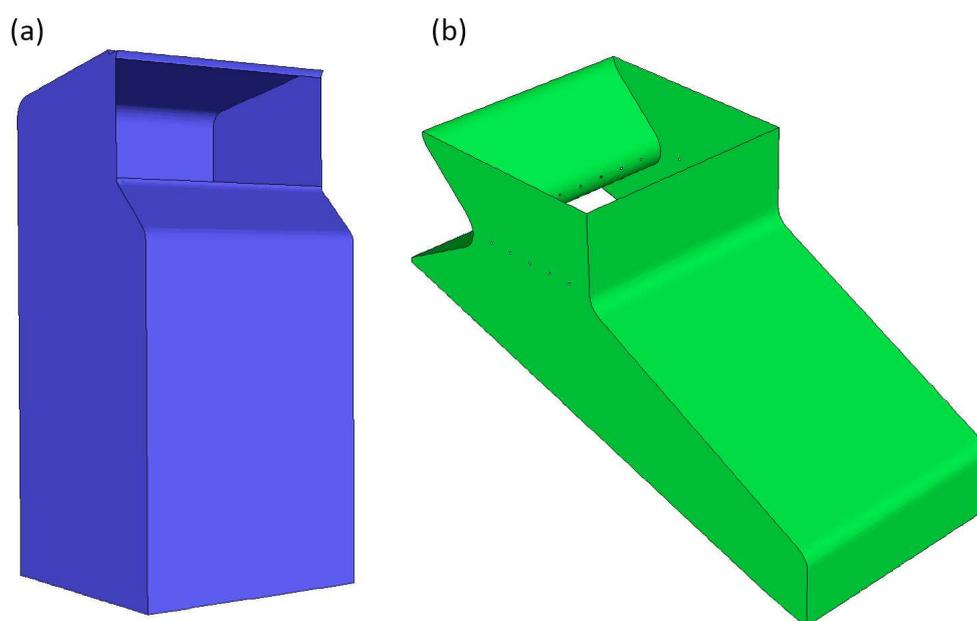


Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

A temperatura prescrita nas paredes d'água foi determinada em função da temperatura do vapor no tambor separador, acrescida de 20 °C, na expectativa de contemplar a resistência térmica da parede dos tubos e incrustações.

Na solução do bordo livre, foram consideradas duas regiões distintas para as paredes d'água: com e sem proteção de refratários (Figura 20).

Figura 20 – Representação esquemática das duas regiões das paredes d'água: a) sem refratários; e b) com refratários.



Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

A Tabela 13 apresenta as propriedades físicas relevantes para cada uma dessas regiões.

Tabela 13 – Propriedades físicas dos tubos e tijolos refratários.

Propriedade	Tubo	Refratário
Espessura [mm]	-	115
Calor específico [J/kg-K]	-	960
Condutividade térmica [W/m-K]	-	1,3
Emissividade	0,8	0,6

Fonte: Empresa fabricante da caldeira.

5.4 ESTRATÉGIA DE SOLUÇÃO

Na resolução do caso, optou-se pelo *solver* acoplado pseudo-transiente. O pseudo passo de tempo foi determinado automaticamente com base nas escalas

características de comprimento e velocidade do problema. O esquema de interpolação da pressão adotado foi o PRESTO!. Quanto à discretização espacial, foi utilizado o esquema *Upwind* de segunda ordem para todas as equações, exceto para a equação das ordenadas discretas, na qual foi empregado um esquema *Upwind* de primeira ordem.

Ao realizar simulações de escoamentos reativos, é necessário estabelecer uma sequência de etapas que promova a estabilidade da solução e a convergência dos resultados. A premissa é obter, em cada etapa, valores parciais que sirvam como um bom ponto de partida para o passo seguinte, garantindo a incorporação gradual de todas as condições do problema global.

O primeiro estágio deste estudo foi analisar apenas o escoamento não reativo, na temperatura de entrada dos combustíveis e oxidantes, desconsiderando a equação da energia e a radiação térmica. Depois que bons resultados foram alcançados, as equações de conservação das espécies e da energia foram ativadas, de modo a iniciar a solução das reações químicas. Nesta etapa, por representar um custo computacional elevado, o modelo das ordenadas discretas ainda não é levado em consideração. Por fim, quando as distribuições de temperatura e de frações mássicas atingiram certa estabilidade, a radiação térmica foi computada para a obtenção de resultados definitivos.

A maioria dos resíduos numéricos assumiu valores satisfatoriamente baixos. As equações de conservação do H_2 e do CO apresentaram valores mais elevados, da ordem de 10^{-3} , enquanto as equações para o CO_2 , O_2 , H_2O e energia apresentaram resíduos menores, da ordem de 10^{-5} . Os resíduos para as demais variáveis mantiveram-se entre esses patamares, girando em torno de 10^{-4} . Houve, contudo, dificuldade na obtenção de convergência para a equação da continuidade, onde os resíduos numéricos foram da ordem de 10^{-2} . Apesar de tentativas de reduzir os fatores de sub-relaxação, não foram obtidas melhorias significativas durante a solução do caso. É bastante provável que uma malha mais refinada seja necessária para levar os resíduos a níveis inferiores. Infelizmente, essa alternativa não era viável em termos de capacidade de *hardware* disponível durante o desenvolvimento do trabalho.

Por último, para determinar a convergência da simulação, é essencial monitorar não apenas os resíduos numéricos, mas também os balanços globais e a estabilidade das variáveis de interesse no volume de controle em estudo. Nesse sentido, a solução alcançou a estabilidade de todos os parâmetros monitorados.

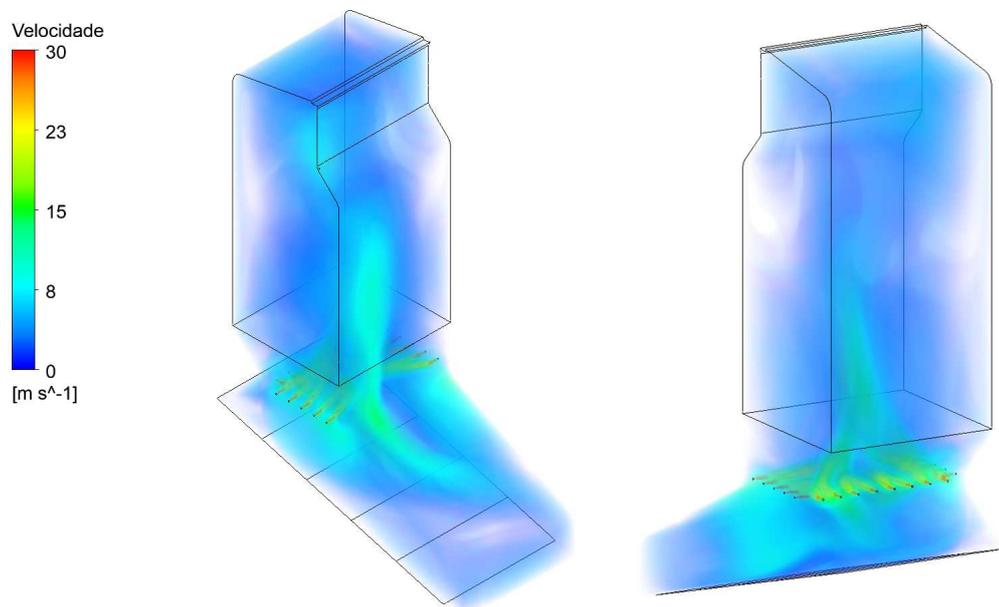
6 RESULTADOS

6.0.1 Campo de velocidade

A Figura 21 apresenta a renderização da velocidade no interior da fornalha.

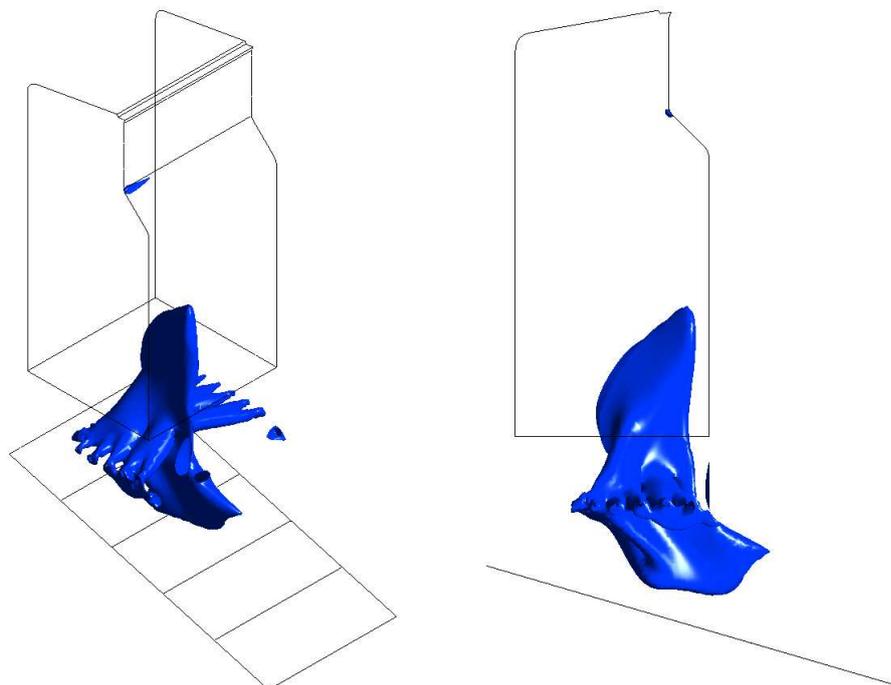
Na Figura 22, é possível observar uma isosuperfície que engloba a região em que a velocidade dos gases é superior a 10 m/s. Dessa forma, torna-se evidente que os valores mais elevados se concentram nas proximidades da parede frontal. Também é nessa região que se encontram os níveis mais elevados de energia cinética turbulenta.

Figura 21 – Renderização volumétrica da velocidade.



Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

Figura 22 – Isosuperfície para velocidades iguais a 10 m/s.

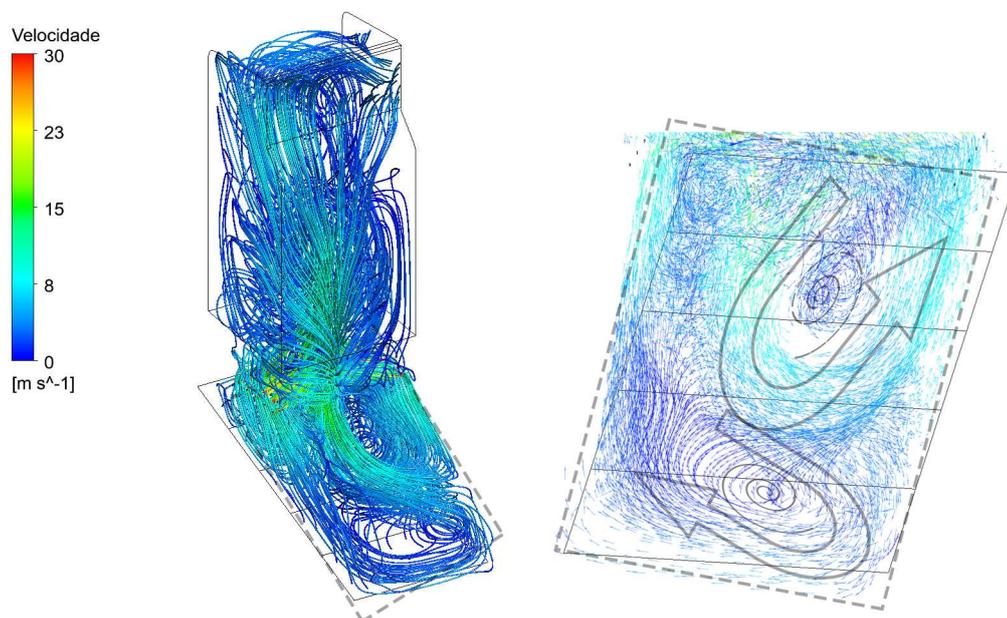


Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

Outro resultado interessante pode ser observado ao se analisar as linhas de corrente do escoamento, conforme ilustrado pela Figura 23. Identificam-se dois grandes movimentos de recirculação de gases, acompanhados pela formação de turbilhões. O primeiro, de maior velocidade, acontece sobre as primeiras zonas das grelhas, enquanto o segundo, com velocidades menores, acontece nas porções finais da fornalha.

Este resultado é contra intuitivo no sentido de que, dadas as condições de contornos simétricas, esperavam-se distribuições igualmente simétricas. É possível que assimetrias na malha introduzam pequenas assimetrias na solução. Nesse caso, resultados simétricos poderiam ser obtidos através de um maior refino de malha. É importante ressaltar, no entanto, que geometria e condições de contorno simétricas não implicam, necessariamente, em um escoamento simétrico. Se o problema for fisicamente instável, a solução numérica em regime permanente poderá apresentar resultados largamente assimétricos, mesmo que tenha partido de condições iniciais simétricas. Em regime transiente, o comportamento observado seria periódico ou caótico, com resultados assimétricos em quase todo instante de tempo.

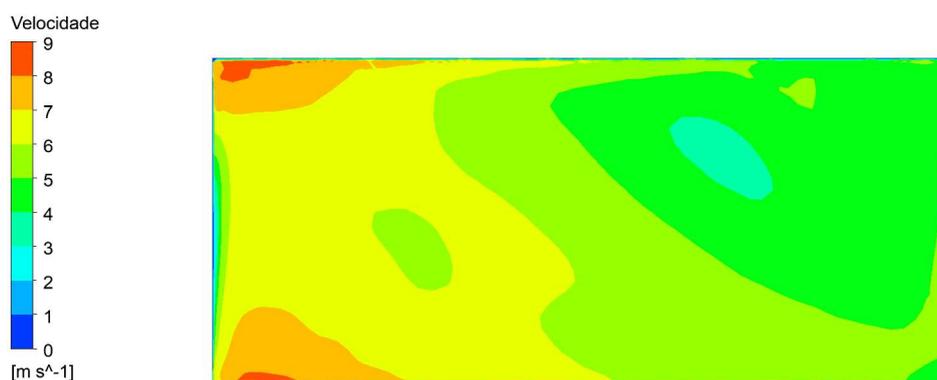
Figura 23 – Linhas de corrente.



Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

Na saída, a vazão mássica foi calculada em 26,2 kg/s, com velocidade média de 5,6 m/s. Os contornos locais de velocidade são apresentados na Figura 24.

Figura 24 – Contornos de velocidade na saída da fornalha.

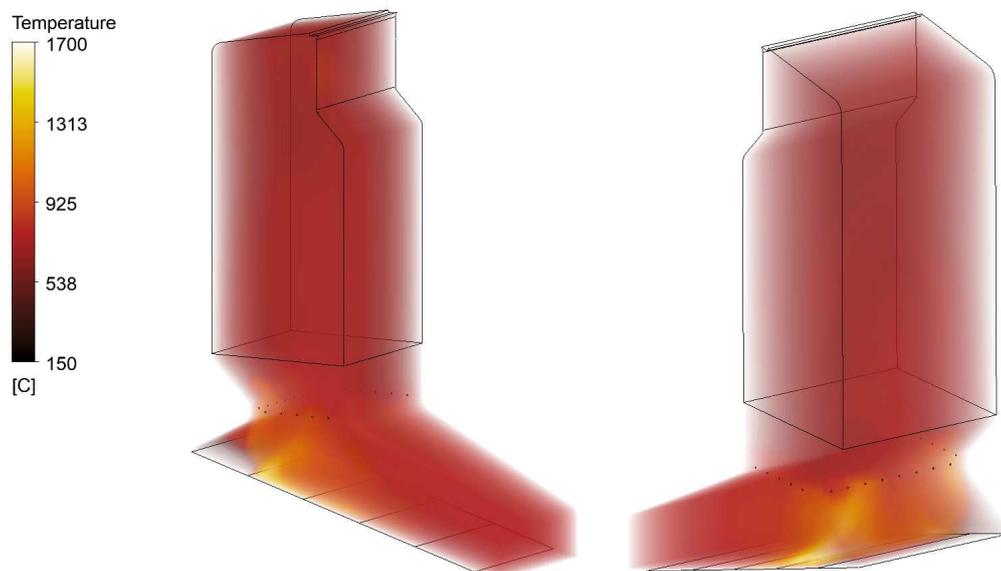


Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

6.0.2 Distribuição de temperatura

A distribuição de temperatura na câmara de combustão é apresentada na Figura 25. Os valores de pico atingiram cerca de 1690 °C, enquanto a temperatura média na saída foi calculada em 761 °C.

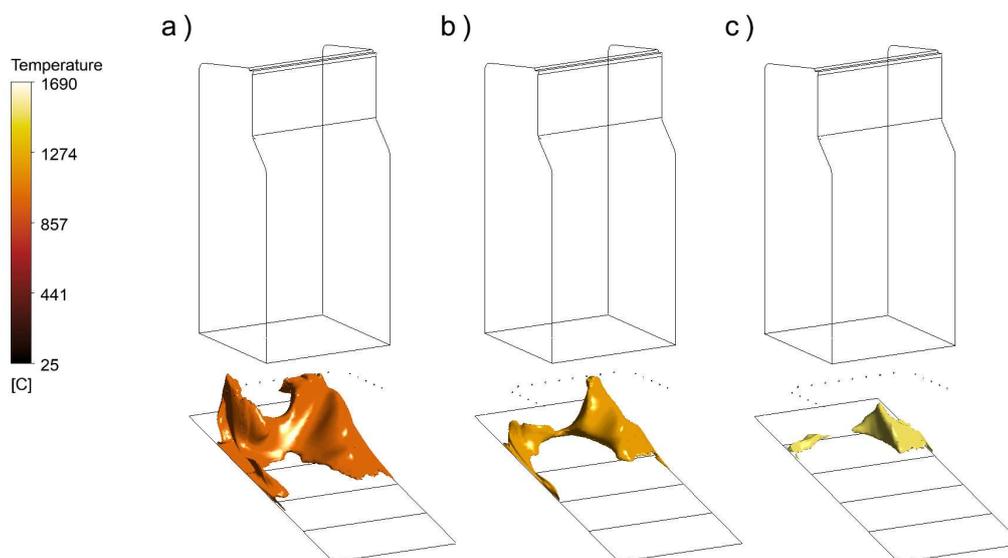
Figura 25 – Renderização volumétrica da temperatura.



Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

Em simulações numéricas, uma abordagem comum para delimitar a região da chama é identificar as áreas que apresentam as temperaturas mais elevadas. Nesse sentido, a Figura 26 destaca os pontos em que as temperaturas são superiores a 1000 °C, 1200 °C e 1500 °C, respectivamente.

Figura 26 – Isosuperfícies para temperaturas iguais a a) 1000 °C, b) 1200 °C e c) 1500 °C.

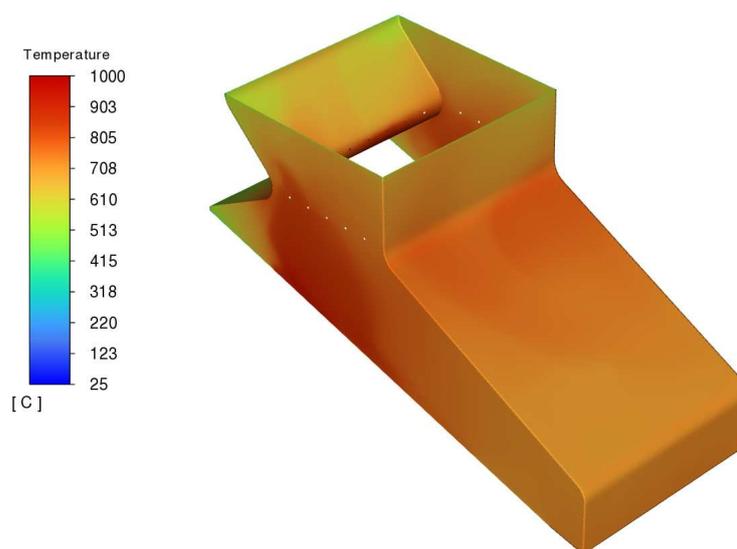


Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

As imagens sugerem que a chama se concentra predominantemente na segunda zona das grelhas, onde há maior liberação de gases voláteis. Os valores de pico ocorrem logo acima do leito de biomassa, nas proximidades das paredes laterais. Também é possível verificar certa assimetria na distribuição das temperaturas, que pode ser atribuída aos movimentos de recirculação descritos anteriormente.

Outro aspecto a ser considerado diz respeito à temperatura na superfície dos tijolos refratários (Figura 27). Embora a condução de calor tenha sido abordada de maneira simplificada, sendo calculada apenas ao longo da espessura do material, os resultados são indicativos das regiões mais suscetíveis à degradação. Temperaturas em torno de 1000 °C podem estar próximas ou até mesmo exceder a capacidade de resistência desses tijolos, dependendo da composição dos mesmos.

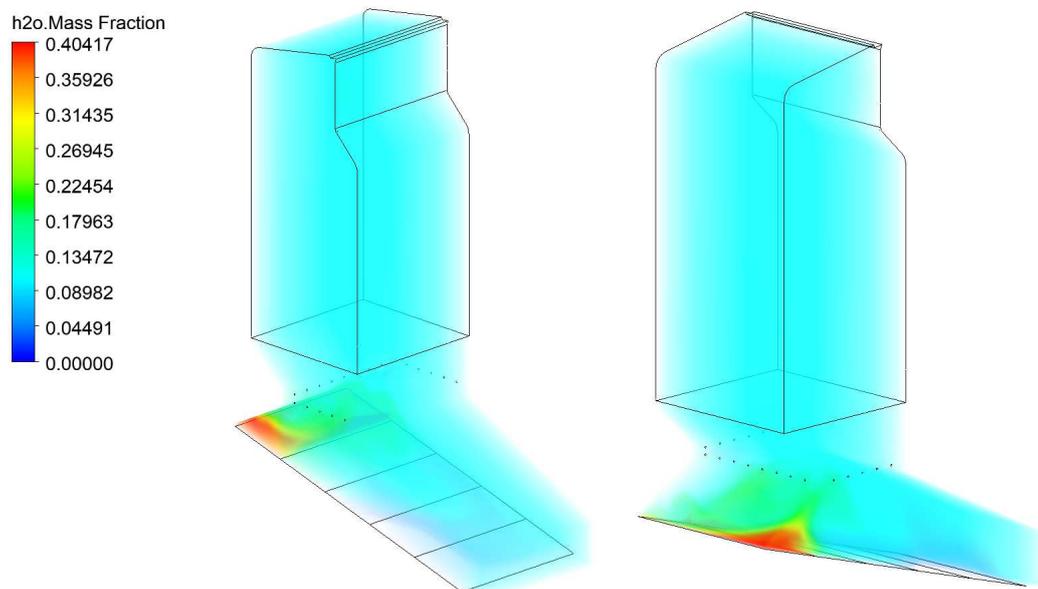
Figura 27 – Distribuição de temperatura na superfície dos tijolos refratários.



Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

6.0.3 Distribuição de espécies químicas

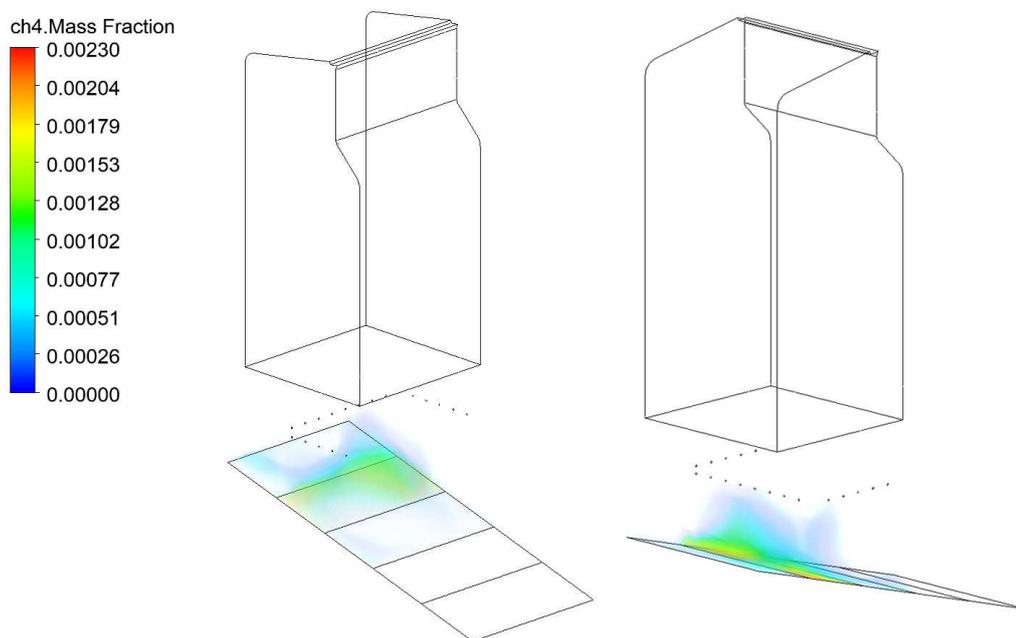
A Figura 28 ilustra a distribuição de água no interior da fornalha. Na região de secagem, a água pode compor até 40% da mistura gasosa em termos de massa, mantendo valores que giram em torno de 10% no restante do domínio.

Figura 28 – Renderização volumétrica da fração mássica de H_2O .

Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

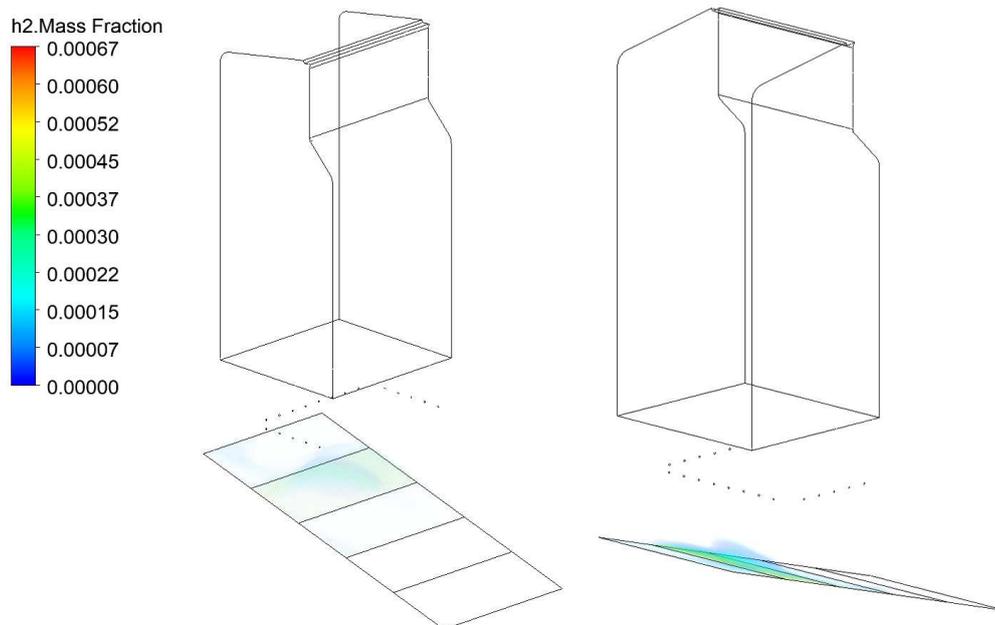
Anteriormente, foi mencionado que uma das maneiras de processar os resultados a fim de delimitar a região da chama é identificar as áreas com temperaturas mais elevadas. Outra abordagem, relacionada a essa, envolve a análise da fração mássica de combustíveis, como o CH_4 e o H_2 , na fornalha. Isso se fundamenta no fato de que a chama se desenvolve onde a concentração desses combustíveis for suficientemente alta para sustentar a reação de combustão. Nesse contexto, apresentam-se os resultados de CH_4 (Figura 29) e H_2 (Figura 30) para a fornalha em estudo. Nota-se que as temperaturas são maiores nas regiões em que as concentrações de ambas as espécies se sobrepõem consideravelmente.

Figura 29 – Renderização volumétrica da fração mássica de CH_4 .



Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

Figura 30 – Renderização volumétrica da fração mássica de H_2 .

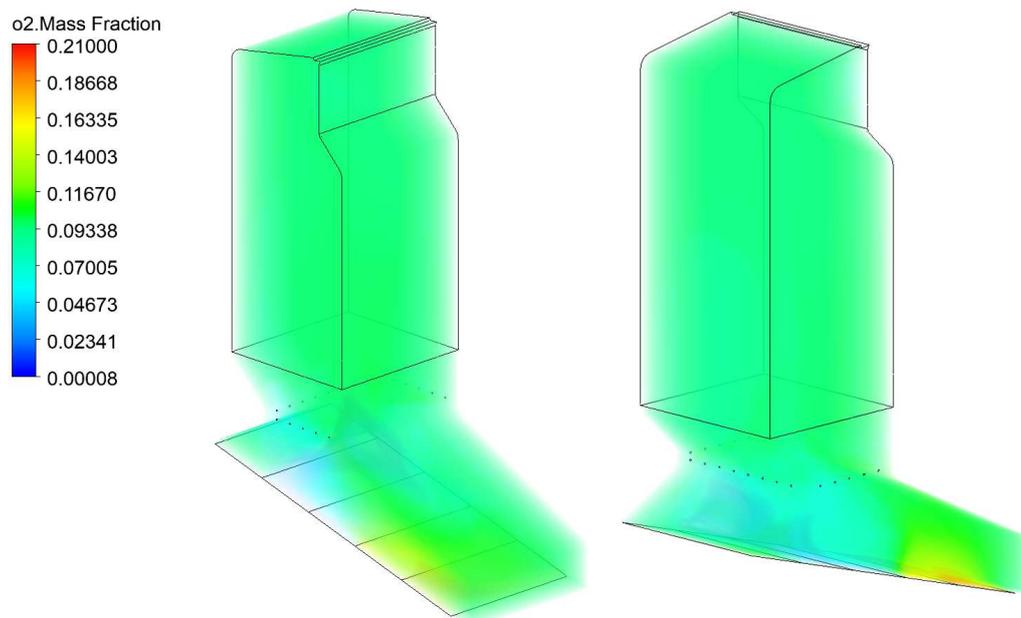


Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

A forma como ocorre a distribuição de oxigênio na câmara de combustão pode ser observada na Figura 31. A fração mássica de O_2 apresenta valores menores nas

zonas 2 e 3, devido ao seu consumo nas reações de oxidação dos gases voláteis e do monóxido de carbono. Como esperado, verifica-se uma concentração maior nas últimas zonas do leito, que constituem a região de resfriamento das cinzas.

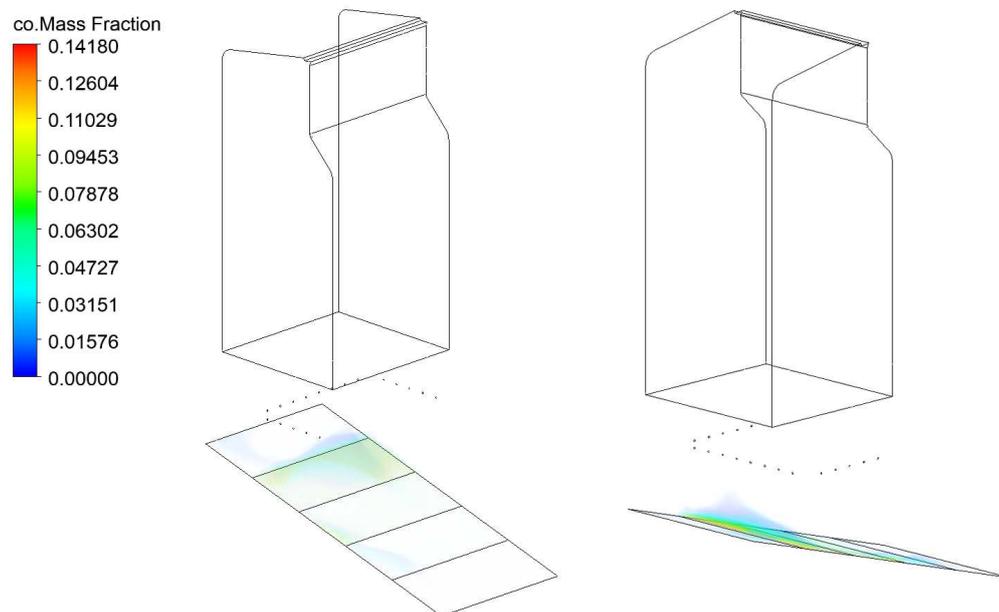
Figura 31 – Renderização volumétrica da fração mássica de O_2 .



Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

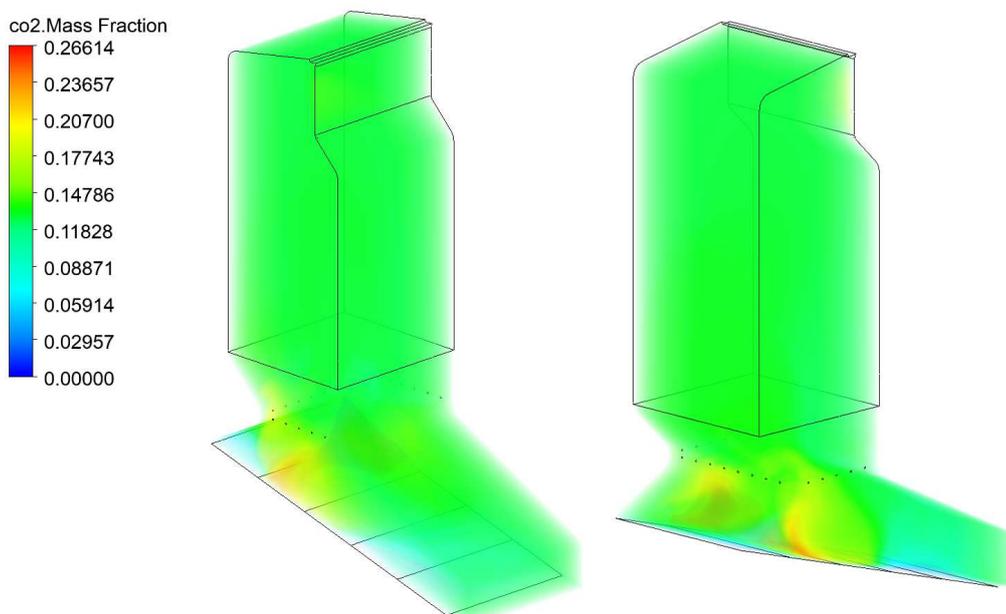
A seguir, nas Figuras 32 e 33, são apresentados os resultados correspondentes às frações mássicas de CO e CO_2 , respectivamente.

Figura 32 – Renderização volumétrica da fração mássica de CO .



Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

Figura 33 – Renderização volumétrica da fração mássica de CO_2 .



Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

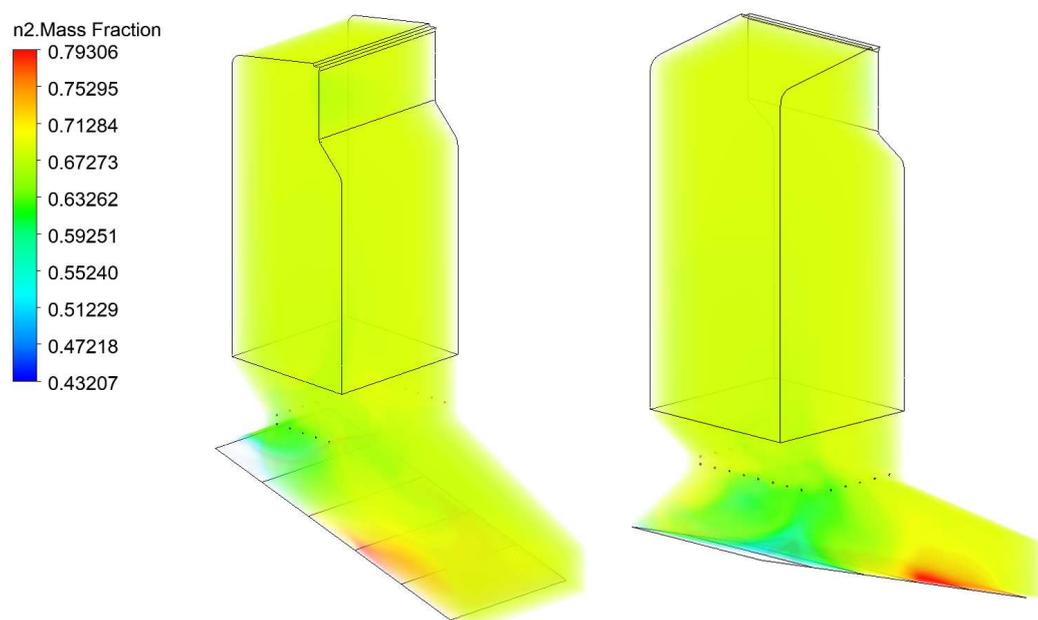
Nas regiões onde é mais substancial, o monóxido de carbono pode corresponder a até 14% da massa da mistura gasosa. No entanto, ele é rapidamente oxidado e torna-

se escasso a partir do ponto de injeção do ar secundário.

A fração mássica de dióxido de carbono, por sua vez, pode atingir valores de aproximadamente 26% nas proximidades da chama. O CO_2 distribui-se da maneira mais ou menos homogênea no restante do volume, com teores de cerca de 10% e 15% na região de resfriamento de cinzas e nas partes mais altas da fornalha, respectivamente.

Por fim, a Figura 34 ilustra a distribuição de N_2 , componente inerte, no bordo livre.

Figura 34 – Renderização volumétrica da fração mássica de N_2 .



Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

6.0.4 Confiabilidade do modelo

Um aspecto importante relacionado à confiabilidade do modelo diz respeito à malha numérica. A discretização espacial deve ser suficientemente refinada para possibilitar o cálculo preciso dos gradientes das variáveis de interesse. É comum encontrar na literatura análises de sensibilidade de malha, nas quais se avalia alterações nos resultados decorrentes do aumento da densidade da malha.

No contexto específico de estudos que abordam a combustão de biomassa em grelha, é válido mencionar o trabalho de Karim e Naser (2018b). Durante o estudo de uma unidade de 4 MW, os autores compararam valores médios de temperatura, O_2 e CO_2 em função da altura da fornalha, considerando malhas com 61000, 100000 e 134000 elementos. Ao comparar as malhas de menor e maior qualidade, verificaram diferenças percentuais médias de 6,5% e 5,6% para a temperatura da chama e a con-

centração de CO_2 , respectivamente. Os resultados relacionados ao O_2 permaneceram inalterados.

Com base nesses valores, é improvável que as variações eventualmente encontradas no presente estudo tenham magnitudes significativamente maiores, uma vez que a densidade da malha, isto é, a quantidade de elementos pelo volume do domínio, manteve-se aproximadamente a mesma entre os dois casos.

Outro ponto de fragilidade do estudo, que também representa uma limitação ao aplicar a metodologia em novos projetos, é a suposição das taxas de conversão da biomassa ao longo do comprimento das grelhas (Figura 16). Embora diversos estudos indiquem percentuais semelhantes para as mesmas regiões das grelhas, estimativas incorretas poderiam resultar em valores inconsistentes para as temperaturas e frações mássicas das espécies.

Para validar os valores obtidos, seria necessário utilizar uma sonda refrigerada a água, semelhante àquela empregada por Razmjoo (2018), para analisar os gases liberados pelo leito em cada uma das zonas. Infelizmente, esse tipo de experimento não pôde ser realizado neste estudo.

Por fim, para avaliar a acurácia do modelo, é possível comparar resultados obtidos por simulação com dados experimentais da região de saída da câmara de combustão, fornecidos pela empresa fabricante.

De acordo com os registros de operação, foram observadas temperaturas próximas a $777\text{ }^\circ\text{C}$, enquanto o valor médio calculado pelo modelo foi de $761\text{ }^\circ\text{C}$, resultando em uma diferença relativa de aproximadamente 2%.

Quanto às frações mássicas, as diferenças obtidas também se mantiveram dentro de limites razoáveis, conforme indicado na Tabela 14.

Tabela 14 – Frações mássicas na região de saída da fornalha: comparação entre simulação e valores fornecidos pelo fabricante.

Espécie química	Simulação	Fabricante
H_2O	10,9%	12,7%
O_2	8,2%	6,5%
CO_2	14,4%	16,5%
N_2	66,5%	64,3%

Fonte: Elaborada pelo próprio autor.

Visando avaliar a integração desse mesmo gerador de vapor com coletores solares do tipo Fresnel, Pérez *et al.* (2023) obtiveram dados experimentais de operação da planta em cargas parciais. Uma série de informações estão disponíveis a partir do primeiro superaquecedor. Embora os valores obtidos nesta dissertação não sejam diretamente comparáveis com os valores medidos, percebe-se que a ordem de grandeza das variáveis é consistente. Os autores observaram uma vazão mássica de 26 kg/s para os gases de combustão quando a planta estava operando a 85% da

carga nominal. Na exaustão, foram registradas frações volumétricas de oxigênio que variaram de 4,8% a 7,3%, em base seca, para cargas de 40% a 80%. Nas mesmas condições, as frações volumétricas de dióxido de carbono apresentaram valores entre 12,4% e 15,5%.

Para uma comparação mais precisa, seria necessário abordar com simulação numérica não apenas a fornalha, mas também os superaquecedores e evaporadores complementares, durante operação em carga parcial. Isso permitiria utilizar os dados apresentados por Pérez *et al.* (2023) para validar o modelo desenvolvido.

7 CONCLUSÃO

Para alcançar o objetivo geral de analisar a queima de cavacos de eucalipto no interior de uma câmara de combustão que utiliza grelhas reciprocantes, este estudo seguiu uma série de etapas.

Na primeira delas, o processo de conversão da biomassa em leito foi descrito por meio de um modelo matemático. A área das grelhas foi dividida em zonas ao longo do seu comprimento, e, para cada uma delas, taxas de secagem, desvolatilização e oxidação do carvão foram prescritas. Através de balanços de massa e energia, determinou-se a temperatura, vazão mássica e concentração de espécies químicas dos gases que deixam o leito de biomassa em cada uma das zonas.

Em seguida, o processo de combustão gasosa na fornalha foi abordado com o método dos volumes finitos. Os resultados do modelo analítico para o leito serviram como condições de contorno nesta etapa. Diversas equações de conservação foram resolvidas no domínio de interesse, incluindo a conservação da massa, quantidade de movimento linear, energia e espécies, bem como a conservação de variáveis relacionadas ao modelo de turbulência (energia cinética turbulenta e taxa de dissipação).

A combustão propriamente dita foi modelada através da metodologia *Finite-Rate/Eddy-Dissipation*, que leva em consideração tanto a cinética química quanto os efeitos da mistura de reagentes devido à turbulência. A radiação na fornalha foi computada por meio do modelo das ordenadas discretas (DO), que calcula a transferência de calor por radiação em todas as direções angulares discretas para cada ponto do domínio.

Por fim, indo ao encontro do terceiro objetivo específico desta dissertação, foram avaliadas as distribuições de H_2O , CH_4 , H_2 , O_2 , CO , CO_2 e N_2 , bem como os campos de velocidade e temperatura, na condição de projeto do equipamento. Ao comparar as variáveis calculadas com medições experimentais, conclui-se que os resultados obtidos apresentam boa concordância.

Em termos gerais, foi encontrada uma diferença relativa de 2,1% para a temperatura média na saída da câmara de combustão. Em relação às espécies químicas, também foram observadas diferenças relativas aceitáveis, de até 2,2%. Portanto, levando em conta os resultados obtidos, é possível inferir que o modelo proposto descreve com acurácia adequada o processo de queima de cavacos de eucalipto no interior da fornalha de grelhas reciprocantes.

Dentre os resultados relevantes, destacam-se os valores obtidos para as temperaturas mais elevadas, da ordem de 1690 °C. Isso sugere a necessidade de uma investigação mais aprofundada para melhorar a uniformidade do gradiente térmico. Certamente, valores dessa magnitude estariam associados a um elevado grau de degradação das grelhas na queima de biomassa.

Este trabalho foi conduzido com a premissa de desenvolver uma metodologia relativamente ágil e rápida, mas que seja capaz de prever de maneira coerente a distribuição das principais variáveis do sistema de combustão. Embora essa consideração seja importante para o ambiente industrial, é possível que tenha limitado os resultados obtidos. Com mais tempo e recursos computacionais adequados, seria viável considerar uma abordagem lagrangiana para o problema.

7.1 TRABALHOS FUTUROS

Vários pontos foram considerados para trabalhos futuros, construídos a partir deste estudo, com destaque para:

- Um maior esforço experimental no sentido de coletar dados como velocidades, temperaturas e concentrações, visando a validação da metodologia proposta.
- A modelagem de toda a planta, incluindo superaquecedores e evaporadores, durante operação em carga parcial, a fim de comparar os resultados com os dados experimentais apresentados por Pérez *et al.* (2023).
- Uma abordagem mais aprofundada para o leito de biomassa, em especial para os mecanismos de desvolatilização da biomassa.
- O emprego de mecanismos cinéticos detalhados, como o GRI-Mech 3.0, para avaliar a formação de espécies químicas intermediárias nocivas ao meio ambiente, como o NO_x .

REFERÊNCIAS

AGÊNCIA NACIONAL DE ENERGIA ELÉTRICA. **Atlas de energia elétrica do Brasil**. 3. ed. Brasília: ANEEL, 2008.

BAIN, Richard L.; OVEREND, Ralph P.; CRAIG, Kevin R. Biomass-fired power generation. **Fuel Processing Technology**, v. 54, n. 1-3, p. 1–16, 1998.

BASU, Prabir. **Biomass Gasification, Pyrolysis and Torrefaction**. 2. ed. Boston: Academic Press, 2013.

BRADBURY, Allan; SAKAI, Yoshio; SHAFIZADEH, Fred. A Kinetic Model for Pyrolysis of Cellulose. **Journal of Applied Polymer Science**, v. 23, p. 3271–3280, jun. 1979.

CEREIJO, Germán Navarrete. **Modelagem simplificada e simulação da combustão de uma partícula de biomassa suspensa em escoamento unidimensional**. Dez. 2014. Diss. (Mestrado) – Universidade Estadual de Campinas.

CHANDRASEKHAR, S. **Radiative Transfer**. [S.l.]: Dover Publications, 1960.

CHAPELA, Sergio; PORTEIRO, Jacobo; MÍGUEZ, José Luis; BEHRENDT, Frank. Eulerian CFD fouling model for fixed bed biomass combustion systems. **Fuel**, v. 278, p. 118251, 2020.

COLLAZO, J.; PORTEIRO, J.; PATIÑO, D.; GRANADA, E. Numerical modeling of the combustion of densified wood under fixed-bed conditions. **Fuel**, v. 93, p. 149–159, 2012.

DONG, Wei; BLASIAK, Włodzimierz. CFD modeling of ecotube system in coal and waste grate combustion. **Energy Conversion and Management**, v. 42, n. 15-17, p. 1887–1896, 2001.

DUFFY, Neil. **Investigation of Biomass Combustion in Grate Furnaces using CFD**. 2012. Tese (Doutorado) – National University Of Ireland, Galway.

DUFFY, Neil; EATON, John. Investigation of 3D flow and heat transfer in solid-fuel grate combustion: Measures to reduce high-temperature degradation. **Combustion and Flame**, v. 167, p. 422–443, 2016.

DUFFY, Neil; EATON, John. Investigation of factors affecting channelling in fixed-bed solid fuel combustion using CFD. **Combustion and Flame**, v. 160, n. 10, p. 2204–2220, 2013.

DUTYKH, Denys. **Modélisation Mathématique des Tsunamis**. 2007. Tese (Doutorado) – L'École Normale Supérieure de Cachan, Cachan.

EMPRESA DE PESQUISA ENERGÉTICA. **Balanco Energético Nacional**. Rio de Janeiro: EPE, 2020.

FATEHI, M.; KAVIANY, M. Adiabatic reverse combustion in a packed bed. **Combustion and Flame**, v. 99, n. 1, p. 1–17, 1994.

FROMENT, Gilbert; BISCHOFF, Kenneth; DE WILDE, Juray. **Chemical Reactor Analysis and Design**. 3. ed. Hoboken: Wiley, 2010.

GHABI, Chekib; BENTICHA, Hmaied; SASSI, Mohamed. Two-Dimensional Computational Modeling and Simulation of Wood Particles Pyrolysis in a Fixed Bed Reactor. **Combustion Science and Technology**, v. 180, n. 5, p. 833–853, 2008.

GÓMEZ, M.A.; PORTEIRO, J.; PATIÑO, D.; MÍGUEZ, J.L. CFD modelling of thermal conversion and packed bed compaction in biomass combustion. **Fuel**, v. 117, p. 716–732, 2014.

GÓMEZ, Miguel; COMESAÑA, Roberto; FEIJOO, Miguel; EGUÍA, Pablo. Simulation of the Effect of Water Temperature on Domestic Biomass Boiler Performance. **Energies**, v. 5, n. 4, p. 1044–1061, 2012.

GONZÁLEZ, William A.; PÉREZ, Juan F.; CHAPELA, Sergio; PORTEIRO, Jacobo. Numerical analysis of wood biomass packing factor in a fixed-bed gasification process. **Renewable Energy**, v. 121, p. 579–589, 2018.

HAMEED, Samreen; SHARMA, Abhishek; PAREEK, Vishnu; WU, Hongwei; YU, Yun. A review on biomass pyrolysis models: kinetic, network and mechanistic models. **Biomass and Bioenergy**, v. 123, p. 104–122, abr. 2019.

INTERNATIONAL ENERGY AGENCY. **World Energy Statistics**. Paris: IEA, 2019.

JAHIRUL, Mohammad; RASUL, Mohammad; CHOWDHURY, Ashfaque; ASHWATH, Nanjappa. Biofuels Production Through Biomass Pyrolysis — A Technological Review. **Energies**, v. 5, p. 4952–5001, dez. 2012.

JONES, Janny; LEA-LANGTON, Amanda; MA, Lin; POURKASHANIAN, Mohamed; WILLIAMS, Alan. **Pollutants Generated By The Combustion Of Solid Biomass Fuels**. 1. ed. [S.l.]: Springer, 2014.

JUŘENA, Tomáš. **Numerical Modelling of Grate Combustion**. 2012. Tese (Doutorado) – Brno University of Technology, Brno.

KÆR, Søren. Straw combustion on slow-moving grates? a comparison of model predictions with experimental data. **Biomass and Bioenergy**, v. 28, n. 3, p. 307–320, 2005.

KÆR, Søren; ROSENDAHL, Lasse; BAXTER, Larry. Towards a CFD-based mechanistic deposit formation model for straw-fired boilers. **Fuel**, v. 85, n. 5-6, p. 833–848, 2006.

KARIM, Rezwanul; NASER, Jamal. CFD modelling of combustion and associated emission of wet woody biomass in a 4 MW moving grate boiler. **Fuel**, v. 222, p. 656–674, jun. 2018a.

KARIM, Rezwanul; NASER, Jamal. Numerical study of the ignition front propagation of different pelletised biomass in a packed bed furnace. **Applied Thermal Engineering**, v. 128, p. 772–784, 2018b.

LAUNDER, B.E.; SPALDING, D.B. The numerical computation of turbulent flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 3, n. 2, p. 269–289, 1974.

MAGNUSSEN, B.F.; HJERTAGER, B.H. On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. **Symposium (International) on Combustion**, v. 16, n. 1, p. 719–729, 1977.

MAHMOUDI, Amir Houshang; BESSERON, Xavier; HOFFMANN, Florian; MARKOVIC, Miladin; PETERS, Bernhard. Modeling of the biomass combustion on a forward acting grate using XDEM. **Chemical Engineering Science**, v. 142, p. 32–41, 2016.

MALISKA, Clovis Raimundo. **Transferência de Calor e Mecânica Dos Fluidos Computacional**. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2017.

PÉREZ, Álvaro A. Díaz; BURIN, Eduardo Konrad; BAZZO, Edson. Part load operation analysis of a biomass steam generator integrated with a Linear Fresnel solar field. **Energy**, v. 282, p. 128590, 2023.

PETERSEN, Svend Skovgaard. **CFD Modelling of a Biomass Incinerator for Prediction of Risk Areas for Corrosion Damages**. 2012. Diss. (Mestrado) – Danmarks Tekniske Universitet, Kongens Lyngby.

QUIRINO, Waldir; VALE, Ailton; ANDRADE, Ana Paula; ABREU, Vera Lúcia; AZEVEDO, Ana Cristina. Poder calorífico da madeira e de materiais lignocelulósicos. **Revista da Madeira**, p. 100–106, abr. 2005.

RAHDAR, Mohammad Hosseini; NASIRI, Fuzhan; LEE, Bruno. A Review of Numerical Modeling and Experimental Analysis of Combustion in Moving Grate Biomass Combustors. **Energy & Fuels**, v. 33, n. 10, p. 9367–9402, 2019.

RAJH, Boštjan; YIN, Chungeng; SAMEC, Niko; HRIBERŠEK, Matjaz; ZADRAVEC, Tomas. Advanced modelling and testing of a 13 MWth waste wood-fired grate boiler with recycled flue gas. **Energy Conversion and Management**, v. 125, p. 230–241, 2016.

RAJIKA, J. K. A. T.; NARAYANA, Mahinsasa. Modelling and simulation of wood chip combustion in a hot air generator system. **SpringerPlus**, v. 5, n. 1, 2016.

RANZI, Eliseo; CUOCI, Alberto; FARAVELLI, Tiziano; FRASSOLDATI, Alessio; MIGLIAVACCA, Gabriele; PIERUCCI, Sauro; SOMMARIVA, Samuele. Chemical Kinetics of Biomass Pyrolysis. **Energy Fuels**, v. 22, p. 4292–4300, out. 2008.

RAZMJOO, Narges. **Characterization Of Conversion Zones In A Reciprocating Grate Furnace Firing Wet Woody Biomass**. 2018. Tese (Doutorado) – Linnaeus University, Växjö.

ROGERS, Joseph Edward Lloyd. **Solid fuel combustion and its applications to the incineration of solid refuse**. 1973. Tese (Doutorado) – Massachusetts Institute Of Technology, Massachusetts.

RYU, Changkook; SHIN, Donghoon; CHOI, Sangmin. Effect of fuel layer mixing in waste bed combustion. **Advances in Environmental Research**, v. 5, n. 3, p. 259–267, 2001.

SABELSTRÖM, Hanna Katarina. **Diffusion of solid fuel on a vibrating grate**. 2007. Tese (Doutorado) – Aalborg University, Ålborg.

SAMIEI, K.; PETERS, B. Experimental and numerical investigation into the residence time distribution of granular particles on forward and reverse acting grates. **Chemical Engineering Science**, v. 87, p. 234–245, 2013.

SCHARLER, Robert; FLECKL, Thomas; OBERNBERGE, Ingwald. Modification of a Magnussen Constant of the Eddy Dissipation Model for biomass grate furnaces by means of hot gas in-situ FT-IR absorption spectroscopy. **Progress in Computational Fluid Dynamics, An International Journal**, v. 3, p. 102, 2003.

SCHULZE, Kai; SCHARLER, Robert; OBERNBERGER, Ingwald. Development of an advanced CFD model for ash deposit and aerosol formation in biomass fired boilers. *In: PROC. 9TH European Conference on Industrial Furnaces and Boilers*. Estoril, Portugal: [s.n.], 2011. P. 1–11.

SCOTT, Donald; PISKORZ, Jan; RADLEIN, Desmond. Liquid products from the continuous flash pyrolysis of biomass. **Industrial & Engineering Chemistry Process Design And Development**, v. 24, p. 581–588, jul. 1985.

SOMWANGTHANAROJ, Surapoom; FUKUDA, Suneerat. CFD modeling of biomass grate combustion using a steady-state discrete particle model (DPM) approach. **Renewable Energy**, v. 148, p. 363–373, 2020.

SOSA-ARNAO, Juan Harold. **Caldeiras Aquatubulares de Bagaço – Estudo do Sistema de Recuperação de Energia**. 2007. Tese (Doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Campinas.

SUDBROCK, Florian; SIMSEK, Erdem; RICKELT, Stefan; WIRTZ, Siegmund; SCHERER, Viktor. Discrete element analysis of experiments on mixing and stoking of monodisperse spheres on a grate. **Powder Technology**, v. 208, n. 1, p. 111–120, 2011.

THUNMAN, Henrik; LECKNER, Bo. Ignition and propagation of a reaction front in cross-current bed combustion of wet biofuels. **Fuel**, v. 80, p. 473–481, mar. 2001.

THUNMAN, Henrik; NIKLASSON, Fredrik; JOHNSON, Filip; LECKNER, Bo. Composition of Volatile Gases and Thermochemical Properties of Wood for Modeling of Fixed or Fluidized Beds. **Energy & Fuels**, v. 15, p. 1488–1497, out. 2001.

THURNER, Franz; MANN, Uzi. Kinetic investigation of wood pyrolysis. **Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development**, v. 20, p. 482–488, jul. 1981.

TU, Yaojie; ZHOU, Anqi; XU, Mingchen; YANG, Wenming; SIAH, Keng Boon; SUBBAIAH, Prabakaran. NO_x reduction in a 40 t/h biomass fired grate boiler using internal flue gas recirculation technology. **Applied Energy**, v. 220, p. 962–973, 2018.

URNS, Stephen. **Introdução à Combustão**: Conceitos e aplicações. 3. ed. Porto Alegre: Amgh, 2013.

VAN LOO, Sjaak; KOPPEJAN, Jaap. **The Handbook Of Biomass Combustion And Co-Firing**. London: Earthscan, 2008.

VARELA, Luis G.; GÓMEZ, M.A.; GARABATOS, Marco; GLEZ-PEÑA, Daniel; PORTEIRO, J. Improving the bed movement physics of inclined grate biomass CFD simulations. **Applied Thermal Engineering**, v. 182, p. 116043, 2021.

XIA, Zihong; SHAN, Peng; CHEN, Caixia; DU, Hailiang; HUANG, Jie; BAI, Li. A two-fluid model simulation of an industrial moving grate waste incinerator. **Waste Management**, v. 104, p. 183–191, 2020.

YANG, Y.B.; GOH, Y.R.; ZAKARIA, R.; NASSERZADEH, V.; SWITHENBANK, J. Mathematical modelling of MSW incineration on a travelling bed. **Waste Management**, v. 22, n. 4, p. 369–380, 2002.

YANG, Y.B.; LIM, C.N.; GOODFELLOW, J.; SHARIFI, V.N.; SWITHENBANK, J. A diffusion model for particle mixing in a packed bed of burning solids. **Fuel**, v. 84, n. 2-3, p. 213–225, 2005.

YIN, Chungen; ROSENDAHL, Lasse; KÆR, Søren. Grate-firing of biomass for heat and power production. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 34, n. 6, p. 725–754, 2008.

ZADRAVEC, Tomas; YIN, Chungen; KOKALJ, Filip; SAMEC, Niko; RAJH, Boštjan. The impacts of different profiles of the grate inlet conditions on freeboard CFD in a waste wood-fired grate boiler. **Applied Energy**, v. 268, p. 115055, 2020.

ZHOU, Anqi; XU, Hongpeng; TU, Yaojie; ZHAO, Feiyang; ZHENG, Zhiming; YANG, Wenming. Numerical investigation of the effect of air supply and oxygen enrichment on the biomass combustion in the grate boiler. **Applied Thermal Engineering**, v. 156, p. 550–561, 2019.

APÊNDICE A – CÓDIGOS DA PROGRAMAÇÃO EM MATLAB PARA O MODELO DO LEITO DE BIOMASSA

```
1
2 % INPUTS -----
3
4 % Definição das zonas
5
6 grelhado_largura=5.14; % [m]
7
8 for i=1:5
9     zona_comprimento(i)=2.15; % [m]
10 end
11
12 % Biomassa: análise imediata e vazão de alimentação
13
14 m_cb=4.16; % [kg/s]
15 cb_h2o=0.3375;
16 cb_volatil=0.5754;
17 cb_carbonofixo=0.08301;
18
19 % Ar primário: propriedades e distribuição
20
21 ap_o2=0.233;
22 ap_n2=0.767;
23 T_ap=407; % [K]
24 m_ap(1)=0.10*15.26; % [kg/s]
25 m_ap(2)=0.30*15.26; % [kg/s]
26 m_ap(3)=0.30*15.26; % [kg/s]
27 m_ap(4)=0.16*15.26; % [kg/s]
28 m_ap(5)=0.14*15.26; % [kg/s]
29
30 % Distribuição das taxas de conversão
31
32 secagem(1)=0.70;
33 secagem(2)=0.20;
34 secagem(3)=0.10;
35 secagem(4)=0;
36 secagem(5)=0;
```

```
37
38 pirolise(1)=0.10;
39 pirolise(2)=0.70;
40 pirolise(3)=0.20;
41 pirolise(4)=0;
42 pirolise(5)=0;
43
44 oxidacao(1)=0.02;
45 oxidacao(2)=0.37;
46 oxidacao(3)=0.45;
47 oxidacao(4)=0.12;
48 oxidacao(5)=0.04;
49
50 % Radiação incidente
51
52 q_rad(1)=2410.82; % [kW]
53 q_rad(2)=5972.52; % [kW]
54 q_rad(3)=2072.52; % [kW]
55 q_rad(4)=1065.59; % [kW]
56 q_rad(5)=945.76; % [kW]
57
58 % Algumas constantes
59
60 q_op=9208; % [kJ/kg]
61 q_oc=32794; % [kJ/kg]
62 q_vap=2250; % [kJ/kg]
63 q_desv=418; % [kJ/kg]
64
65
66 % CÁLCULOS -----
67
68 for i=1:5
69
70     % Umidade (H2O): vazão mássica por zona
71
72     m_h2o(i)=m_cb*cb_h2o*secagem(i); % [kg/s]
73
74     % Matéria volátil (C0.85 H2.05 O1.08): vazão mássica por zona
75
```

```
76     m_volatil(i)=m_cb*cb_volatil*pirolise(i); % [kg/s]
77
78     % N2: vazão mássica por zona
79
80     m_n2(i)=m_ap(i)*ap_n2; % [kg/s]
81
82 end
83
84 % Loop de temperatura
85
86 for i=1:5
87
88     T_en(i)=1000; % [K]
89     T_ant(i)=0; % [K]
90
91 end
92
93 while abs(T_en(:)-T_ant(:))>0.0000000000000001
94
95     for i=1:5
96
97         % CO: vazão mássica por zona
98
99         m_co(i)=m_cb*cb_carbonofixo*oxidacao(i)*(28/12)*
100         (2512*exp(-6244/T_en(i))/(1+2512*exp(-6420/T_en(i)))); % [kg/s]
101
102         % CO2: vazão mássica por zona
103
104         m_co2(i)=m_cb*cb_carbonofixo*oxidacao(i)*(44/12)*
105         (1/(1+2512*exp(-6420/T_en(i)))); % [kg/s]
106
107         % O2: vazão mássica por zona
108
109         m_o2(i)=ap_o2*m_ap(i)-(16/12)*m_co(i)-(32/12)*m_co2(i); % [kg/s]
110
111         % Mistura gasosa: vazão mássica por zona
112
113         m_en(i)=m_h2o(i)+m_volatil(i)+m_n2(i)+m_co(i)+m_co2(i)+
114         m_o2(i); % [kg/s]
```

```

115
116     % Componentes individuais: frações mássicas por zona
117
118     y_h2o(i)=(m_h2o(i)+(0.3314)*m_volatil(i)+(0.3762*0.242)*
119     m_volatil(i))/m_en(i);
120     y_co(i)=(m_co(i)+(0.06556)*m_volatil(i)+(0.3762*0.7597)*
121     m_volatil(i))/m_en(i);
122     y_co2(i)=(m_co2(i)+(0.2156)*m_volatil(i))/m_en(i);
123     y_o2(i)=m_o2(i)/m_en(i);
124     y_ch4(i)=(0.008681)*m_volatil(i)/m_en(i);
125     y_h2(i)=(0.002543)*m_volatil(i)/m_en(i);
126     y_n2(i)=1-y_h2o(i)-y_co(i)-y_co2(i)-y_o2(i)- y_ch4(i)-y_h2(i);
127
128     % Mistura gasosa: calor específico por zona
129
130     cp_en(i)=y_h2o(i)*cp_h2o(T_in(i))+y_n2(i)*cp_n2(T_en(i))+
131     y_co(i)*cp_co(T_en(i))+y_co2(i)*cp_co2(T_en(i))+y_o2(i)*
132     cp_o2(T_en(i))+y_ch4(i)*cp_ch4(T_en(i))+y_h2(i)*
133     cp_h2(T_en(i)); % [kJ/kg-K]
134
135     % Registro de temperatura
136
137     T_ant(i)=T_en(i);
138
139     % Mistura gasosa: temperatura por zona
140
141     T_en(i)=(q_rad(i)+(12/28)*m_co(i)*q_op+(12/44)*m_co2(i)*q_oc-
142     m_h2o(i)*q_vap-m_volatile(i)*q_desv)/(m_en(i)*cp_en(i))+
143     T_ap; % [K]
144
145     end
146 end

```

```

1
2 function [cp]=cp_h2o(T)
3     cp=8.314*(0.03386842*10^2+0.03474982*10^(-1)*T-0.06354696*10^(-4)*
4     T^2+0.06968581*10^(-7)*T^3-0.02506588*10^(-10)*T^4)/18;
5 end

```

```
1
2 function [cp]=cp_h2(T)
3     cp=8.314*(0.03298124*10^2+0.08249441*10^(-2)*T-0.08143015*10^(-5)*
4     T^2-0.09475434*10^(-9)*T^3+0.04134872*10^(-11)*T^4)/2;
5 end
```

```
1
2 function [cp]=cp_ch4(T)
3     cp=4.184*(-0.29149+26.327*(T/1000)-10.610*(T/1000)^2+1.5656*
4     (T/1000)^3+0.16573*(T/1000)^(-2))/16;
5 end
```

```
1
2 function [cp]=cp_co(T)
3     cp=8.314*(0.03262451*10^2+0.15119409*10^(-2)*T-0.03881755*10^(-4)*
4     T^2+0.05581944*10^(-7)*T^3-0.02474951*10^(-10)*T^4)/28;
5 end
```

```
1
2 function [cp]=cp_co2(T)
3     cp=8.314*(0.02275724*10^2+0.09922072*10^(-1)*T-0.10409113*10^(-4)*
4     T^2+0.06866686*10^(-7)*T^3-0.02117280*10^(-10)*T^4)/44;
5 end
```

```
1
2 function [cp]=cp_o2(T)
3     cp=8.314*(0.03212936*10^2+0.11274864*10^(-2)*T-0.05756150*10^(-5)*
4     T^2+0.13138773*10^(-8)*T^3-0.08768554*10^(-11)*T^4)/32;
5 end
```

```
1
2 function [cp]=cp_n2(T)
3     cp=8.314*(0.03298677*10^2+0.14082404*10^(-2)*T-0.03963222*10^(-4)*
4     T^2+0.05641515*10^(-7)*T^3-0.02444854*10^(-10)*T^4)/28;
5 end
```