

AVALIAÇÃO DINÂMICA DE UM GASEIFICADOR DE LEITO FLUIDIZADO BORBULHANTE: MODELAGEM MATEMÁTICA E SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Darlan Antônio Andrade Moutinho Junior
Jornandes Dias da Silva

Darlan Antônio Andrade Moutinho Junior
Jornandes Dias da Silva

Avaliação Dinâmica de um Gaseificador de Leito Fluidizado Borbulhante: Modelagem Matemática e
Simulação Computacional

1ª ed.

Piracanjuba-GO
Editora Conhecimento Livre
Piracanjuba-GO

1ª ed.

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

Moutinho Junior, Darlan Antônio Andrade
M765A Avaliação Dinâmica de um Gaseificador de Leito Fluidizado Borbulhante: Modelagem
Matemática e Simulação Computacional
/ Darlan Antônio Andrade Moutinho Junior. Jornandes Dias da Silva. – Piracanjuba-GO

Editora Conhecimento Livre, 2023

105 f.: il

DOI: 10.37423/2023.edcl848

ISBN: 978-65-5367-411-0

Modo de acesso: World Wide Web

Incluir Bibliografia

1. modelagem-matemática 2. simulação-computacional 3. gaseificação 4. leito-fluidizado I.
Moutinho Junior, Darlan Antônio Andrade II. Silva, Jornandes Dias da III. Título

CDU: 660

<https://doi.org/10.37423/2023.edcl848>

O conteúdo dos artigos e sua correção ortográfica são de responsabilidade exclusiva dos seus respectivos autores.

EDITORIA CONHECIMENTO LIVRE

Corpo Editorial

MSc Edson Ribeiro de Britto de Almeida Junior

MSc Humberto Costa

MSc Thays Merçon

MSc Adalberto Zorzo

MSc Taiane Aparecida Ribeiro Nepomoceno

PHD Willian Douglas Guilherme

MSc Andrea Carla Agnes e Silva Pinto

MSc Walmir Fernandes Pereira

MSc Edisio Alves de Aguiar Junior

MSc Rodrigo Sanchotene Silva

MSc Wesley Pacheco Calixto

MSc Adriano Pereira da Silva

MSc Frederico Celestino Barbosa

MSc Guilherme Fernando Ribeiro

MSc. Plínio Ferreira Pires

MSc Fabricio Vieira Cavalcante

PHD Marcus Fernando da Silva Praxedes

MSc Simone Buchignani Maigret

Dr. Adilson Tadeu Basquerote

Dra. Thays Zigante Furlan

MSc Camila Concato

PHD Miguel Adriano Inácio

MSc Anelisa Mota Gregoleti

PHD Jesus Rodrigues Lemos

MSc Gabriela Cristina Borborema Bozzo

MSc Karine Moreira Gomes Sales

Dr. Saulo Cerqueira de Aguiar Soares

MSc Pedro Panhoca da Silva

MSc Helton Rangel Coutinho Junior

MSc Carlos Augusto Zilli

MSc Euvaldo de Sousa Costa Junior

Dra. Suely Lopes de Azevedo

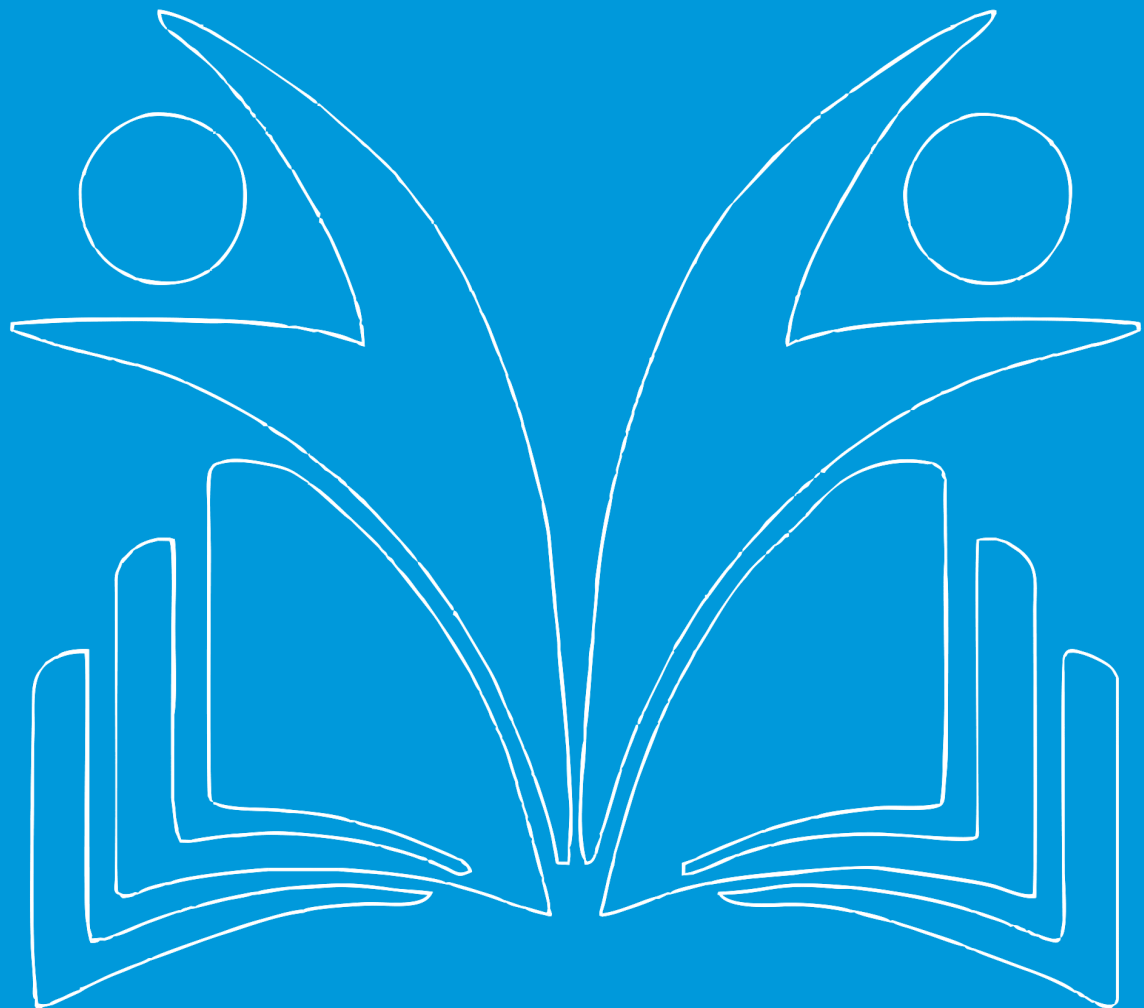
MSc Francisco Odecio Sales

MSc Ezequiel Martins Ferreira

MSc Eliane Avelina de Azevedo Sampaio



10.37423/2023.edcl848





PREFÁCIO

Esta pesquisa apresenta um modelo matemático dinâmico para estudar o comportamento das temperaturas das fases gasosa (T_g) e sólida (T_s) bem como as frações molares do oxigênio (O_2), monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono (CO_2), vapor da água (H_2O), hidrogênio (H_2) e carbono (C(s)) da região de gaseificação do gaseificador de leito fluidizado borbulhante. O modelo matemático foi discretizado usando a técnica de diferença finita para transformar o sistema de EDPs em um sistema de EDOs. O sistema de EDOs tem sido resolvido com a implementação do método Runge-Kutta Gill para examinar os perfis T_g e T_s assim como os perfis das espécies químicas de O_2 , CO, CO_2 , H_2O , H_2 e C(s). A estimação dos perfis permite a quantificação das previsões das variáveis individuais presentes na pesquisa, permitindo obter informações valiosas a respeito da região de gaseificação em análise. O modelo desenvolvido permitiu as validações da temperatura da fase gasosa (T_g) e da espécie química (CO). Procedendo de uma forma mais completa, têm sido realizadas simulações para analisar o comportamento de T_g e T_s ao longo da região de gaseificação. Além disso, foi analisado uma análise de sensibilidade para T_g e T_s usando a temperatura inicial da fase gasosa $T_{g,0}$. Por outro lado, foi mostrado uma análise de sensibilidade para verificar a produção de CO e H_2 usando como variável de teste a vazão de entrada da fase gasosa (Q_g). Além do mais, analisou-se o comportamento das taxas líquidas para cada espécie química.

SÍMBOLOS E SIGLAS

C_{CO}	Concentração da espécie química do CO (kg/m ³)
C_{H_2}	Concentração da espécie química do H ₂ (kg/m ³)
C_{H_2O}	Concentração da espécie química do H ₂ O (kg/m ³)
C_{O_2}	Concentração da espécie química do O ₂ (kg/m ³)
$C_{p,g}$	Cap. calorífica da fase gasosa na pressão constante (J kg ⁻¹ K ⁻¹)
$C_{p,s}$	Cap. calorífica do carvão na pressão constante (J kg ⁻¹ K ⁻¹)
d_c	Diâmetro da região de gaseificação (m)
D_{O_2}	Coeficiente de difusão para O ₂ (m ² s ⁻¹)
D_{CO}	Coeficiente de difusão para CO (m ² s ⁻¹)
D_{CO_2}	Coeficiente de difusão para CO ₂ (m ² s ⁻¹)
D_{H_2O}	Coeficiente de difusão para H ₂ O (m ² s ⁻¹)
D_{H_2}	Coeficiente de difusão para H ₂ (m ² s ⁻¹)
$D_{C(s)}$	Coeficiente de difusão para C _(s) (m ² s ⁻¹)
d_p	Diâmetro da partícula (m)
$E_{a,1}$	Energia de ativação da Equação de $k_{r,1}$ da Tabela (3.1) (J/mol)
$E_{a,2}$	Energia de ativação da Equação de f_r da Tabela (3.1) (J/mol)
$E_{a,3}$	Energia de ativação da Equação de $k_{r,2}$ da Tabela (3.2) (J/mol)
$E_{a,4}$	Energia de ativação da Equação de $K_{(2), H_2O}$ da Tabela (3.2) (J/mol)
$E_{a,5}$	Energia de ativação da Equação de $K_{(2), H_2}$ da Tabela (3.2) (J/mol)
$E_{a,6}$	Energia de ativação da Equação de $K_{(2), CO}$ da Tabela (3.2) (J/mol)
$f_{(1)}$	Fator de correção da Equação (3.1)
$f_{(2)}$	Fator de correção da Equação (3.2)
f_r	Parâmetro dado na Tabela (3.1) (J/mol)
h	Passo do Metodo de Runge-Kutta Gill
h_{gs}	Coef. de transferência de calor convectivo gás-sólido (W m ⁻² K ⁻¹)
h_{gw}	Coef. de transferência convectivo gás-parede (W m ⁻² K ⁻¹)
$K_{CO,0}$	fator de frequência de adsorção para o CO na Tabela (3.2) (mol/m ³)
$K_{H_2,0}$	fator de frequência de adsorção para H ₂ na Tabela (3.2) (mol/m ³)
$K_{H_2O,0}$	fator de frequência de adsorção para H ₂ O na Tabela (3.2) (mol/m ³)
$K_{2, CO}$	Constante de adsorção para o CO na Tabela (3.2) (mol/m ³)
K_{2, H_2}	Constante de adsorção para o H ₂ na Tabela (3.2) (mol/m ³)
K_{2, H_2O}	Constante de adsorção para o H ₂ O na Tabela (3.2) (mol/m ³)

K_g	Condutividade térmica da fase sólida ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$)
k_{gs}	Coefficiente de Transferência de massa (m s^{-1})
$k_{r1,0}$	Fator de frequência dado na Tabela (3.1) ($\text{m}^3/\text{mol s}$)
$k_{r2,0}$	Fator de frequência dado na Tabela (3.2) ($\text{m}^3/\text{mol s}$)
$k_{r,1}$	Constante de reação na Equação (3.1) ($\text{m}^3/\text{mol s}$)
$k_{r,2}$	Constante de reação na Equação (3.2) ($\text{m}^3/\text{mol s}$)
K_s	Condutividade térmica da fase gasosa ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$)
P	Pressão (kPa)
M_c	Massa molar do carbono (kg/mol)
N_s	Vazão de sólido (kg s^{-1})
Q_g	Vazão de gás ($\text{m}^3 \text{s}^{-1}$)
Q_v	Vazão de vapor de água ($\text{m}^3 \text{s}^{-1}$)
$R_{3.1}$	Taxa da reação química (3.1) ($\text{m}^3/\text{mol s}$)
$R_{3.2}$	Taxa da reação química (3.2) ($\text{m}^3/\text{mol s}$)
r_{O_2}	Taxa líquida do O_2 ($\text{m}^3/\text{mol s}$)
r_{CO}	Taxa líquida do CO ($\text{m}^3/\text{mol s}$)
r_{CO_2}	Taxa líquida do CO_2 ($\text{m}^3/\text{mol s}$)
r_{H_2O}	Taxa líquida do H_2O ($\text{m}^3/\text{mol s}$)
r_{H_2}	Taxa líquida do H_2 ($\text{m}^3/\text{mol s}$)
$r_{C(s)}$	Taxa líquida do $C_{(s)}$ ($\text{m}^3/\text{mol s}$)
S_{gs}	Área específica gás-sólido da região de gaseificação (m^{-1})
$T_{g,0}$	Temperatura inicial do gás ($^{\circ}\text{C}$)
$T_{s,0}$	Temperatura inicial do sólido ($^{\circ}\text{C}$)
T_w	Temperatura inicial da parede ($^{\circ}\text{C}$)
$Y_{O_2,0}$	Fração molar inicial do O_2 (-)
$Y_{CO,0}$	Fração molar inicial do CO (-)
$Y_{CO_2,0}$	Fração molar inicial do CO_2 (-)
$Y_{H_2O,0}$	Fração molar inicial da H_2O (-)
$Y_{H_2,0}$	Fração molar inicial do H_2 (-)
$Y_{C(s),0}$	Fração molar inicial do $C_{(s)}$ (-)

LETRAS GREGAS

α	Coeficiente na reação química (3.1)
β	Coeficiente na reação química (3.2)
ε_g	Fração de vazio da fase gasosa (-)
ρ_g	Densidade da fase gasosa (kg m^{-3})
ρ_s	Densidade da fase sólida (kg m^{-3})
ε_s	Fração de vazio da fase sólida (-)
$\Delta H_{r,3.1}$	Calor de reação para reação (I) (850°C) (kJ mol^{-1})
$\Delta H_{r,3.2}$	Calor de reação para reação (II) (850°C) (kJ mol^{-1})

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2.1- Alternativas tecnológicas a partir da conversão da biomassa.....	16
Figura 3.1- Esquema simplificado de um gaseificador de leito fluidizado borbulhante.....	29
Figura 3.2- Região delimitada do gaseificador para o estudo do trabalho.....	30
Figura 3.3- Esquema Simplificado para os Processos que envolvem as Seguintes Zonas: (I) Zona de Secagem, (II) Zona de Pirólise e (III) Zona da Conversão do Carvão.....	31
Figura 3.4- Conjunto de reações formadas na região de gaseificação a partir de biomassa, depois das etapas de secagem e pirólise.....	33
Figura 4.1- Esquema Simplificado de uma malha para o método de diferença finita.....	43
Figura 5.1- Comparações dos perfis de temperaturas do gás preditos e os resultados de Ross et al., (2004) nas seguintes condições: $t = 5 \text{ seg}$, $Q_g = 8,795 \times 10^{-1} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, $T_g = 450^\circ\text{C}$ e $T_s = 470^\circ\text{C}$	68
Figura 5.2- Perfis de temperaturas para as fases gasosa e sólida nas seguintes condições: $t = 7 \text{ seg}$, $Q_g = 9,875 \times 10^{-1} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, $T_g = 450^\circ\text{C}$ e $T_s = 470^\circ\text{C}$	68
Figura 5.3- Perfis da temperatura na fase gasosa para diferentes $T_{g,0}$ nas seguintes condições: $t = 7 \text{ seg}$, $Q_g = 9,875 \times 10^{-1} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$	69
Figura 5.4- Perfis da temperatura da fase sólida para diferentes $T_{g,0}$ nas seguintes condições: $t = 7 \text{ seg}$, $Q_g = 9,875 \times 10^{-1} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$	70
Figura 5.5- Comparações dos perfis de concentração preditos para CO e dados de Peterson e Werther (2005) versus a temperatura do gaseificador na região de gaseificação do leito fluidizado borbulhante: $t = 4 \text{ seg}$, $Q_g = 8,975 \times 10^{-1} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ e $T_g = 550^\circ\text{C}$	71
Figura 5.6- Perfis das frações molares para as espécies químicas O_2 , CO , CO_2 , H_2O , H_2 e C(s) versus a distância axial da região gaseificação do gaseificador de fluidizado borbulhante: $t = 7 \text{ seg}$, $Q_g = 9,875 \times 10^{-1} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, $T_{g,0} = 450^\circ\text{C}$ e $T_{s,0} = 470^\circ\text{C}$	72
Figura 5.7- Perfis das frações molares para as espécies químicas CO e H_2 versus a distância axial da região gaseificação do gaseificador de fluidizado borbulhante: $t = 7 \text{ seg}$, $Q_g = 8,575 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, $T_{g,0} = 450^\circ\text{C}$ e $T_{s,0} = 470^\circ\text{C}$	73

Figura 5.8- Perfis das frações molares para as espécies químicas CO e H₂ versus a distância axial da região gaseificação do gaseificador de fluidizado borbulhante: $t = 7$ seg, $Q_g = 7,675 \times 10^{-4} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, $T_{g,0} = 450^\circ\text{C}$ e $T_{s,0} = 470^\circ\text{C}$74

Figura 5.9- Perfis das frações molares para as espécies químicas CO e H₂ versus a distância axial da região gaseificação do gaseificador de fluidizado borbulhante: $t = 7$ seg, $Q_g = 6,395 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, $T_{g,0} = 450^\circ\text{C}$ e $T_{s,0} = 470^\circ\text{C}$74

Figura 5.10- Perfis das taxas líquidas para as espécies químicas O₂, CO, CO₂, H₂O, H₂ e C(s) versus a distância axial da região gaseificação do gaseificador de fluidizado borbulhante: $t = 7$ seg, $Q_g = 9,875 \times 10^{-1} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, $T_{g,0} = 450^\circ\text{C}$ e $T_{s,0} = 470^\circ\text{C}$75

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 2.1- Comparação das composições dos gases de saída para um gaseificador de leito fluidizado atmosférico e pressurizado.....	19
Tabela 2.2- Reações heterogêneas e homogêneas para o processo de gaseificação.....	23
Tabela 2.3- Valores do poder calorífico de diversos combustíveis.....	26
Tabela 3.1- Parâmetros cinéticos intrínsecos para a Equação (3.3) acima.....	34
Tabela 3.2- Parâmetros cinéticos intrínsecos para a Equação (3.4) acima.....	35
Tabela 5.1- Valores de entrada das condições de operações, propriedades das fases gasosa e sólida usados na simulação (Ross et al., 2004; Petersen e Werther, 2005).....	66

Sumário

1.INTRODUÇÃO	14
CAPÍTULO 2.....	16
2.REVISÃO DA LITERATURA	16
2.1.CLASSIFICAÇÃO DE GASEIFICADORES PARA PROCESSAR DE COMBUSTÍVEIS SÓLIDOS	17
2.2.EQUAÇÕES GERAIS DE BALANÇOS DE MOMENTO, ENERGIA E MASSA PARA DIMENSIONAMENTO DE GASEIFICADORES	21
2.2.1.PROCESSO FLUIDODINÂMICO PARA GASEIFICADORES	21
2.2.2.PROCESSO TERMODINÂMICO PARA GASEIFICADORES	22
2.2.3.PROCESSO QUÍMICO PARA GASEIFICADORES	22
2.3.COMBUSTÍVEIS	24
2.3.1.PODER CALORÍFICO DOS COMBUSTÍVEIS	24
CAPÍTULO 3.....	28
3.MODELAGEM MATEMÁTICA.....	28
3.1.GASEIFICADOR DE LEITO FLUIDIZADO BORBULHANTE	28
3.2.DELIMITAÇÃO DO PROBLEMA.....	29
3.2.1.FORMULAÇÃO DO PROBLEMA FÍSICO	30
3.2.2. ZONA DE SECAGEM	31
3.2.3. ZONA DE PIRÓLISE	32
3.CARBONO RESIDUAL, ISTO É, O RESTANTE DO RESÍDUO SÓLIDO.	32
3.2.4.ZONA DE OXIDAÇÃO E REDUÇÃO	32
3.2.5.DESCRICÃO DO MECANISMO CINÉTICO PARA ESTA PESQUISA	33
3.3.FORMULAÇÃO DO MODELO CINÉTICA	34
3.4.MODELAGEM PARA AS FASES GASOSA E SÓLIDA.....	37
3.4.1.EQUAÇÕES SIMPLIFICADAS DO MODELO MATEMÁTICO.....	37
3.4.1.1.BALANÇOS DE ENERGIA	38
3.4.1.2.BALANÇOS DOS COMPONENTES QUÍMICOS	39
CAPÍTULO 4.....	42

4. SOLUÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO	42
4.1.MÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS	42
4.1.1.APROXIMAÇÃO DA PRIMEIRA E SEGUNDA DERIVADAS PARA A TEMPERATURA DA FASE GASOSA POR DIFERENÇA FINITA	43
4.1.2.APROXIMAÇÃO DA PRIMEIRA E SEGUNDA DERIVADAS PARA A TEMPERATURA DA FASE SÓLIDA POR DIFERENÇA FINITA	45
4.1.3.APROXIMAÇÃO DA PRIMEIRA E SEGUNDA DERIVADAS PARA O ₂ O COMPONENTE QUÍMICO POR DIFERENÇA FINITA	46
4.1.4.APROXIMAÇÃO DA PRIMEIRA E SEGUNDA DERIVADAS PARA CO O COMPONENTE QUÍMICO POR DIFERENÇA FINITA	48
4.1.5.APROXIMAÇÃO DA PRIMEIRA E SEGUNDA DERIVADAS PARA CO ₂ O COMPONENTE QUÍMICO POR DIFERENÇA FINITA	50
4.1.6.APROXIMAÇÃO DA PRIMEIRA E SEGUNDA DERIVADAS PARA H ₂ O O COMPONENTE QUÍMICO POR DIFERENÇA FINITA	52
4.1.7.APROXIMAÇÃO DA PRIMEIRA E SEGUNDA DERIVADAS PARA H ₂ O COMPONENTE QUÍMICO POR DIFERENÇA FINITA	53
4.1.8. APROXIMAÇÃO DA PRIMEIRA E SEGUNDA DERIVADA PARA C _(s) O COMPONENTE QUÍMICO POR DIFERENÇA FINITA	55
4.2.EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS E SUAS CONDIÇÕES DE CONTORNO	57
4.2.1.EQUAÇÃO DIFERENCIAL ORDINÁRIA DA TEMPERATURA DA FASE GASOSA E SUAS CONDIÇÕES DE CONTORNOS	58
4.2.2.EQUAÇÃO DIFERENCIAL ORDINÁRIA DA TEMPERATURA DA FASE SOLIDA E SUAS CONDIÇÕES DE CONTORNOS	58
4.2.3.EQUAÇÃO DIFERENCIAL ORDINÁRIA DO COMPONENTE O ₂ E SUAS CONDIÇÕES DE CONTORNOS	59
4.2.4.EQUAÇÃO DIFERENCIAL ORDINÁRIA DO COMPONENTE CO E SUAS CONDIÇÕES DE CONTORNOS	60
4.2.5.EQUAÇÃO DIFERENCIAL ORDINÁRIA DO COMPONENTE CO ₂ E SUAS CONDIÇÕES DE CONTORNOS	61
4.2.6.EQUAÇÃO DIFERENCIAL ORDINÁRIA DO COMPONENTE H ₂ O E SUAS CONDIÇÕES DE CONTORNOS	61
4.2.7.EQUAÇÃO DIFERENCIAL ORDINÁRIA DO COMPONENTE H ₂ E SUAS CONDIÇÕES DE CONTORNOS	62
4.2.8.EQUAÇÃO DIFERENCIAL ORDINÁRIA DO COMPONENTE C _(s) E SUAS CONDIÇÕES DE CONTORNOS	63
CAPÍTULO 5	65
RESULTADOS E DISCUSSÕES	65
CAPÍTULO 6	76
CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	76

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 78

APÊNDICE (A): SISTEMA DE EDOS DISCRETIZADO 81

APÊNDICE (B): COEFICIENTES REFERENTES À EQUAÇÃO (A-1) 82

APÊNDICE (C): COEFICIENTES. REFERENTES À EQUAÇÃO (A-2) 83

APÊNDICE (D): COEFICIENTES REFERENTES À EQUAÇÃO (A-3)..... 84

APÊNDICE (E): COEFICIENTES REFERENTES À EQUAÇÃO (A-4) 85

APÊNDICE (F): COEFICIENTES REFERENTES À EQUAÇÃO (A-5) 86

APÊNDICE (G): COEFICIENTES REFERENTES À EQUAÇÃO (A-6)..... 87

APÊNDICE (H): COEFICIENTES REFERENTES À EQUAÇÃO (A-7)..... 88

APÊNDICE (I): COEFICIENTES REFERENTES À EQUAÇÃO (A-8) 89

PRIMEIRO PASSO MÉTODO DE RUNGE-KUTTA GILL: 90

SEGUNDO PASSO DO MÉTODO DE RUNGE-KUTTA GILL: 92

TERCEIRO PASSO DO MÉTODO DE RUNGE-KUTTA GILL:..... 95

QUARTO PASSO DO MÉTODO DE RUNGE-KUTTA GILL: 98

EQUAÇÕES ITERATIVAS PARA O MÉTODO DE RANGE – KUTTA GILL 101

CAPÍTULO 1

1.INTRODUÇÃO

A reestruturação do setor elétrico brasileiro prevê inovações tecnológicas no sistema de geração elétrica para o país. O processo de gaseificação integrado em ciclo combinado (ciclo de Brayton + ciclo de Rankine) caracteriza uma tecnologia inovadora. Vale salientar, que esta tecnologia ainda está em fase de aprimoramento, apresenta excelente perspectiva de viabilidade comercial e eficiência significativa superior a tecnologia convencional. A conversão de combustíveis sólidos em gases combustíveis, tendo em vista a utilização destes gases em turbina a gás, tem ganhado crescente destaque no cenário energético mundial, como um modelo a ser desenvolvido em função dos fatores socio- ambientais que o cercam.

Geralmente, o processo de gaseificação de biomassa integrado em ciclo combinado é conhecido pela sigla BIG/GTCC. Vale ressaltar, que esta sigla é originada do inglês como “**Biomass Integrated Gasification Combined Cycle Gas Turbine**”. A valorização de biomassas e conversão do seu potencial energético em energia elétrica em sistema BIG/GTCC se apresenta como uma opção de grande importância para a matriz energética brasileira. No sistema BIG/GTCC, o combustível sólido após ser secado (200°C-400°C) e pirolisado (400oC-800°C), alimenta o gaseificador, onde ocorre a gaseificação (combustão + redução) através de um conjunto de reações heterogêneas e homogêneas. Os gases resultantes da gaseificação são compostos principalmente por CO₂, CO, H₂, CH₄ e N₂. Estes gases ao sair do sistema de gaseificação passam pelo o sistema de limpeza, onde serão eliminados os contaminantes.

A geração de energia elétrica se dá através da combustão dos gases provenientes do sistema de gaseificação (H₂ e CO) isentos de contaminantes em uma turbina a gás acoplada a um alternador, que opera segundo o ciclo de Brayton. Os gases de exaustão são conduzidos a uma caldeira de recuperação, onde é gerado vapor que irá expandir em uma turbina que opera segundo o ciclo de Rankine (tecnologia convencional), e por sua vez é acoplada a outro gerador, produzindo energia elétrica adicional. O rendimento global da tecnologia BIG/GTCC poderá alcançar valores na faixa entre 50% a 60%.

A gaseificação é a conversão de qualquer combustível sólido ou líquido em um gás energético através do processo da oxidação parcial a temperatura elevada. O processo de gaseificação ocorre naturalmente em quatro etapas físico- química distintas com temperaturas de reação diferentes,

como secagem da biomassa, devolatização ou pirólise, redução e combustão. Cada um desses processos pode ser configurado em equipamento diferente, dependendo da sequência determinada pelas características do projeto.

A técnica de gaseificação é, em princípio, extremamente versátil, mas existem muitos problemas em transformar este potencial teórico em uma tecnologia competitiva comercialmente, apesar de ser já viável e prática. As dificuldades residem, não no processo básico de gaseificação, mas sim no projeto de um equipamento que transforma o combustível sólido em um gás de qualidade, com confiabilidade e segurança, adaptado às condições particulares do combustível e da operação (Abdullah et al., 2003; Basu, 1999; Broadhurst e Beckler, 1975). No caso dos gases produzidos serem utilizados para geração de energia elétrica, os requisitos de limpeza destes gases tornam-se de extrema necessidade, devido à sensibilidade das turbinas a gás.

Na prática, as características turbomecânicas de uma turbina a gás impõem severas restrições a presença de particulados, metais alcalinos e moléculas com grandes cadeias carbônicas (alcatrão, dioxina, furano, etc.) condensáveis nos gases combustíveis. Para atender estas restrições, o sistema de limpeza dos gases produzidos é um elemento indispensável no desenvolvimento de uma planta de ciclo combinado. Apesar das elevadas eficiências previstas para as termoelétricas de ciclos combinados, baseados em combustíveis gaseificados derivados de biomassas, os aspectos tecnológicos e a confiabilidade dos sistemas são ainda um ponto crítico do seu desenvolvimento.

CAPÍTULO 2

2.REVISÃO DA LITERATURA

Este novo sistema de tecnologia traz aspectos inovadores que permitem uma geração de energia elétrica em quantidades expressivamente superiores aos sistemas tecnológicos convencionais, isto é, convertendo os combustíveis sólidos (biomassas) em gás de baixo poder calorífico de forma mais eficiente. Porém, esta tecnologia envolve a combinação de ciclos termodinâmicos que reúnem a utilização de turbinas a gás (ciclo de Brayton) juntamente com turbinas a vapor (ciclo de Rankine) fazendo partes da esfera de inovações tecnológicas propostas para viabilizar a melhora do aproveitamento dos recursos energéticos das biomassas (Basu, 1999; Craig et al., 1995; Consonni e Larson, 1996; Craig e Mann, 1996).

Várias rotas tecnológicas para geração de energia elétrica a partir de biomassas, utilizando a conversão de biomassas para gás combustível, são apresentadas na Figura (1). Nessa Figura, mostram-se diversas rotas para transformar biomassas em gás combustível para geração de energia elétrica.

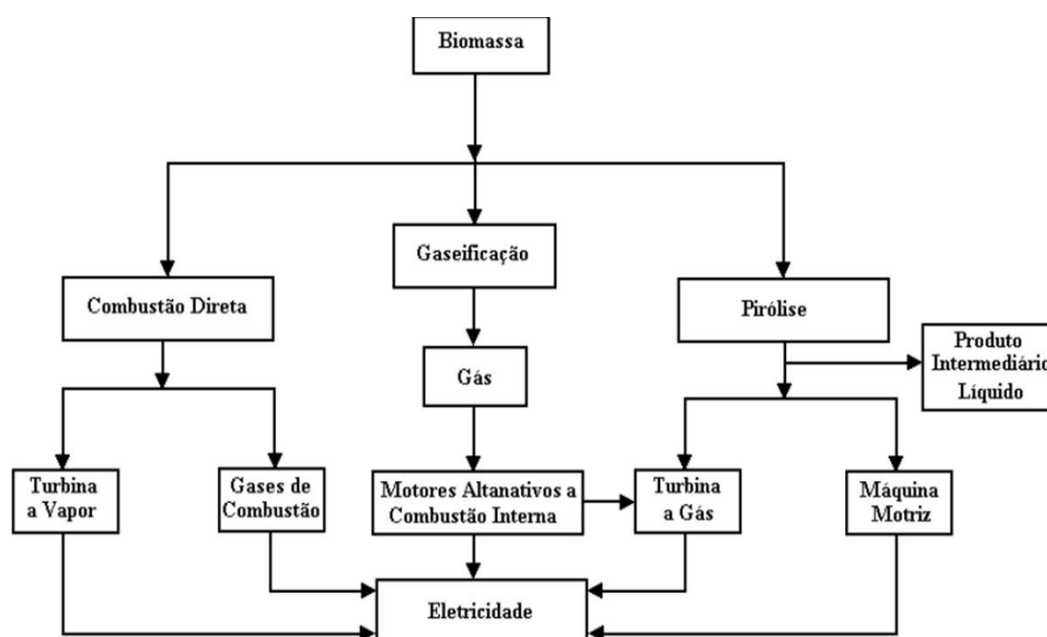


Figura 2. 1. Alternativas tecnológicas a partir da conversão da biomassa

A tecnologia para geração termoelétrica que utiliza uma combinação de turbinas a gás e a vapor, conhecida como ciclo combinado, integrado a um gaseificador de biomassa para produção de gás combustível, resulta no sistema BIG/GTCC (Biomass Integrated Gasification Gás Turbine Combined Cycle). O sistema BIG/GTCC é uma das rotas tecnológicas inovadoras para a valorização de biomassas e conversão de seu potencial energético em energia elétrica.

2.1.CLASSIFICAÇÃO DE GASEIFICADORES PARA PROCESSAR DE COMBUSTÍVEIS SÓLIDOS

Os gaseificadores disponíveis podem ser classificados em três modalidades, tais como fluxo em contracorrente, fluxo co-corrente e leito fluidizado. O *gaseificador de fluxo em contracorrente* é um equipamento, no qual a biomassa pirolisada e o ar entram em sentido oposto, saindo o gás pela parte superior. Os alcatrões produzidos durante esta etapa são arrastados pelos gases que deixam o gaseificador. A biomassa se gaseifica na zona de redução utilizando a energia gerada nas reações químicas que ocorrem na zona de combustão (Farris et al., 1998; Fan et al., 2003; Gabra et al., 2001b).

Neste gaseificador, a eficiência térmica é elevada pelo fato das reações provenientes da zona de combustão liberarem grande quantidade de energia. A presença da zona de combustão pode atingir uma temperatura de 1300°C. Vale ressaltar, que neste equipamento os alcatrões formados com a queima da biomassa devem ser eliminados utilizando um sistema de limpeza dos gases combustíveis.

O gaseificador co-corrente caracteriza-se por apresentar a alimentação de biomassa e ar para a combustão pela extremidade superior e produzirem gases praticamente isento de alcatrões, pois os produtos de pirólise são forçados através de uma zona de combustão, onde a biomassa se encontra incandescente, destruindo termicamente os alcatrões formados e resultando em gases limpos (Gustavsson, 1997; Graham e Walsh, 1996; Gar'ya et al., 2000).

Um fator limitante para este tipo de equipamento é o teor de umidade da biomassa aceitável para o processo, cujo limite está na faixa de 30%, devido à instabilidade provocada pelo o vapor d'água na zona de combustão. Assim, torna-se indispensáveis uma operação de pré-secagem da biomassa que apresenta umidade superior a 30%. Para pequenas unidades, esta pré-secagem não configura maiores problemas técnicos ou econômicos. Porém, para instalações de grande porte, que exigem o manuseio e estocagem de milhares de toneladas mensalmente, esta etapa deve ser considerada como parte integrante do processo de gaseificação (Kersten et al., 2003; Kunii e Levenspiel, 1991; Levenspiel, 2002).

Neste tipo de gaseificador, a zona de combustão é um elemento crítico, pois seu arranjo depende da manutenção da temperatura de operação mínima necessária para garantir o craqueamento dos alcatrões e voláteis, bem como a uniformidade de temperatura por toda seção.

O gaseificador de leito fluidizado caracteriza-se pela formação de um leito de biomassa em suspensão produzido por efeito do fluxo de ar forçado através de um distribuidor. As partículas do combustível são mantidas suspensas em um leito de partículas inertes (areia, cinzas, alumina etc.), fluidizadas pelo

fluxo de ar. A biomassa é alimentada em dimensões reduzidas para permitir a fluidização (Heitor e Whitelaw, 1986; Kerinin e Shifrin, 1993).

O bom contato entre a biomassa e o ar no leito fluidizado faz com que os processos de transferência de massa e energia se realizem com facilidade, obtendo-se uma boa distribuição de temperatura ao longo do equipamento. Nestas condições, não se distinguem as zonas de combustão, redução e pirolise. Duas fases podem ser identificadas na seção transversal do leito: (i) a emulsão; (ii) as bolhas. A emulsão contém as partículas sólidas e o gás que percola (processo de filtragem do gás) através delas. O fluxo de gás na emulsão é limitado pela velocidade mínima de fluidização (Krause, 1990; Kruse et al., 1995; Larson, 1993). Qualquer quantidade maior de gás passa pelo leito na forma de bolhas. As bolhas são praticamente isentas de partículas sólidas, mas em sua passagem pelo leito, algumas partículas são arrastadas por elas.

O leito é aquecido inicialmente por um combustível auxiliar, de qualquer natureza, até que se atinja temperatura suficientemente alta para o início do processo de gaseificação. A temperatura de operação é da ordem de 900°C e os alcatrões e voláteis são destruídos termicamente, resultando em um gás bastante limpo, mas não totalmente. Para produzir um gás completamente isento de alcatrões e voláteis são necessárias temperaturas do leito entre 1100°C e 1200°C (Larson, 1995; Larson e Williams, 1990).

Além de algumas quantidades de alcatrões e voláteis, os gases produzidos no processo de gaseificação tendem a conter carbono não queimado e parte de cinzas contida originalmente no combustível, que devem ser removidos por sistemas de limpeza. A operação dos gaseificadores de leito fluidizado é realizada em temperaturas relativamente mais baixas do que nos gaseificadores de leito fixo, reduzindo significativamente os teores de enxofre e de material particulado, além de diminuir a formação de óxidos de nitrogênios (NOx) (Li et al., 2001; Moutinho Junior e Silva, 2011).

Os gaseificadores de leito fluidizado apresentam fácil controle de temperatura do leito a partir de alimentação de ar e combustível biomássico. Vale ressaltar, que a variação na quantidade de gás consumido pela turbina a gás requer alterações nas alimentações de ar e combustível biomássico fornecidos ao leito fluidizado, tornando o sistema de alimentação parte vital do gaseificador (Lora et al., 1997; Ma et al., 1993; Macchi, 1991). O gaseificador de leito fluidizado apresenta uma concepção mais moderna, sendo atualmente objeto de estudos mais intensos e apresenta perspectivas bastante promissoras, principalmente devido a sua adequação a utilização de combustíveis como bagaço de

cana. Este tipo de gaseificador se apresenta como o mais indicado para instalação de uma planta BIG/GTCC de grande capacidade, atingindo potência de 25MW a 100MW.

Os sistemas de leito fluidizado aplicado à geração de energia elétrica a partir da gaseificação de biomassa estão em desenvolvimento, tanto atmosféricos como pressurizados. A decisão por processo de gaseificação pressurizada ou atmosférica envolve aplicação para geração de potência em sistema BIG/GTCC (Magnussene e Hjertager, 1997, Narva'ez et al., 1996). No caso dos sistemas pressurizados, a principal vantagem nas dimensões do reator só aparece acima de 150MW, enquanto que na faixa de 25MW praticamente não há vantagem significativa.

Os sistemas pressurizados envolvem uma quantidade maior de sofisticação tecnológica dos seus componentes, tais como sistema de alimentação de biomassa, características do leito fluidizado, cinética química e intensificação da dissipação térmica. Os sistemas a pressão atmosférica já possuem sua operação conhecida, enquanto os pressurizados devem passar ainda por um desenvolvimento tecnológico.

A vantagem de utilizar um gaseificador de leito fluidizado pressurizado consiste na eliminação das perdas operacionais com a compressão do combustível quente necessária para a injeção na câmara de combustão de uma turbina a gás (Nordin et al., 1995; Odgers et al., 1993; Scala e Salatino, 2000). Em contrapartida, a desvantagem reside nas perdas provenientes do sistema de alimentação da biomassa que se elevam pelo escapamento de gases e este é o foco de desenvolvimento (Larson e Consonni, 1994). Na Tabela 2.1, apresenta-se uma comparação das composições dos gases de saída de um gaseificador de leito fluidizado atmosférico e pressurizado.

Tabela 2.1: Comparação das composições dos gases de saída para um gaseificador de leito fluidizado atmosférico e pressurizado.

Componentes	Gaseif. Atmosférico	Gaseif. Pressurizado	Unidades
H ₂	12,5	4,0-15,0	% (v/c)
CO	16,3	10,0-19,0	% (v/c)
CO ₂	13,5	14,0-19,0	% (v/c)
CH ₄	4,4	5,0-9,0	% (v/c)
N ₂	52,0	45,0-60,0	% (v/c)
Poder Calorífico	5,1	3,5-6,5	MJ/Nm ³

A conversão de combustíveis sólidos por gaseificação pode ser realizada em vários tipos de reatores, os quais identificados como gaseificadores. O processo de gaseificação ocorre em quatro etapas físico-química, com temperatura de reação diferentes. Estas etapas reúnem a secagem da biomassa, pirólise, redução e combustão. A sequência das reações que ocorre em cada um destes processos está apresentada pelas seguintes reações químicas.

1. Secagem;



2. Pirólise;

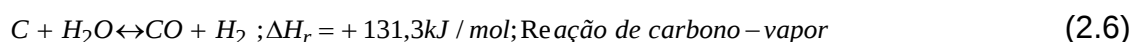
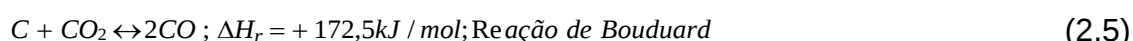


3. Combustão (oxidação do carbono);

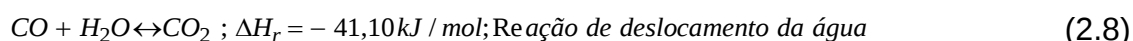


4. Gaseificação;

4.1. Reações heterogêneas



4.2. Reações homogêneas



5. Craqueamento do alcatrão.



O processo de secagem de biomassa situa-se ante do processo de pirólise e apresenta temperaturas suficientemente baixas para evitar a decomposição da biomassa e suficientemente altas para garantir a eliminação da umidade em forma de vapor d'água.

O processo de pirólise vem após o processo de secagem. As reações de pirólise começam a ocorrer à temperatura de 400°C, quando a estrutura das biomassas começa a se decompor por ação térmica.

A combustão (oxidação do carbono) é determinada pela posição da entrada de ar e sua temperatura varia normalmente entre 900°C a 1300°C, resultado da reação exotérmica entre o combustível sólido e o oxigênio do ar no gaseificador. Os gases quentes da região de combustão passam em seguida para a região de redução (gaseificação), onde ocorre o conjunto de reações típicas que originam os componentes combustíveis do gás produzido.

Os principais combustíveis do gás formado são monóxido de carbono (CO), o hidrogênio (H₂) e o metano (CH₄), em percentuais que variam com o tipo de gaseificador, com as condições de operação e com a umidade da biomassa utilizada. Estes parâmetros são fatores que determinam também o grau de contaminação do gás com alcatrões e partículas de fuligem.

2.2.EQUAÇÕES GERAIS DE BALANÇOS DE MOMENTO, ENERGIA E MASSA PARA DIMENSIONAMENTO DE GASEIFICADORES

A aplicabilidade das equações de balanços de momento, energia e massa visa o dimensionamento dos gaseificadores. A partir destas equações de balanços é possível obter parâmetros que servem para caracterizar os processos que ocorrem nos gaseificadores. O conhecimento destes parâmetros otimizados torna o projeto do equipamento tecnicamente viável para uma escala industrial.

A seguir, apresenta-se uma descrição para os processos fluidodinâmico, termodinâmico e químico com suas respectivas equações gerais.

2.2.1.PROCESSO FLUIDODINÂMICO PARA GASEIFICADORES

A fluidodinâmica de um leito fluidizado envolve as equações de balanço de massa e de momento (Sokolov et al., 1995; Nordin et al., 1995; Srinivasan et al., 1998; Syamlal, 1993; Sit e Grace, 1981). Entretanto, as equações de balanço de massa podem ser desenvolvidas para cada fase a partir da equação geral da continuidade, assim expresso:

$$\frac{\partial(\varepsilon_i \rho_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_i \rho_i \vec{v}_i) = \sum_{j=1}^n m_{ji} \quad (2.11)$$

Onde ε_i é a fração de vazio da fase i , ρ_i é a massa específica da fase i e m_{ji} caracterizar a transferência de massa a partir de j para a fase i . Por outro lado, as equações de momentos são desenvolvidas para cada fase a partir da seguinte equação geral:

$$\frac{\partial(\varepsilon_i \rho_i \vec{v}_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_i \rho_i \vec{v}_i \vec{v}_i) = -\varepsilon_i \nabla p + \nabla \cdot \vec{\tau}_i + \varepsilon_i \rho_i \vec{g} + \sum_{j=1}^n (\vec{R}_{ji} + m_{ji} \vec{v}_{ji}) + \varepsilon_i \rho_i (\vec{F}_i + \vec{F}_{as,i} + \vec{F}_{vm,i}) \quad (2.12)$$

Na qual $\vec{\tau}_i$ é o tensor da fase i , p é a pressão de todas as fases, $\vec{g}$ é a aceleração da gravidade, $\vec{F}_i$ é uma força externa, $\vec{F}_{as,i}$ é uma força ascendente, $\vec{F}_{vm,i}$ é uma força de massa virtual, $\vec{R}_{ji}$ é uma força de interação entre as fases.

2.2.2.PROCESSO TERMODINÂMICO PARA GASEIFICADORES

Os potenciais termodinâmicos, tais como energia interna (U), entalpia (H), entropia (S), energia livre de Helmholtz (A) e a energia livre de Gibbs (G) dependem principalmente da temperatura da fase fluida. No entanto, a temperatura da fase fluida pode ser quantificada através de uma equação geral definida por:

$$\frac{\partial(\rho_f T_f)}{\partial t} + \nabla \cdot [\vec{v}_f (\rho_f T_f)] = \nabla \cdot (k_{eff} \nabla T_f) + S_f \quad (2.13)$$

Onde ρ_f é a massa específica da fase fluida, T_f é a temperatura da fase fluida e S_f é o termo de fonte.

2.2.3.PROCESSO QUÍMICO PARA GASEIFICADORES

A combinação de combustível sólido e ($Ar+H_2O$) alimentados para um gaseificador pode ser analisado como um processo químico de gaseificação. Salienta-se que, os gases combustíveis provenientes do processo de gaseificação são matérias primas fundamentais para a produção de energia elétrica através do processo de integração (GLF/TGCC).

O fluxo de ar alimentado para o gaseificador deve-se ter controle rigoroso para que ocorra a combustão parcial e não a combustão total. Na combustão parcial, uma combinação de reações heterogêneas e homogêneas ocorre conforme as equações químicas da Tabela 2.2.

Tabela 2.2: Reações heterogêneas e homogêneas para o processo de gaseificação

Reações Heterogêneas	Reações Homogêneas
$C + CO_2 \xrightleftharpoons[k_{-1}]{k_1} 2CO$	$H_2 + \frac{1}{2}O_2 \xrightleftharpoons[k_{-1}]{k_1} H_2O$
$C + H_2O \xrightleftharpoons[k_{-1}]{k_1} CO + H_2$	$CO + H_2O \xrightleftharpoons[k_{-1}]{k_1} CO_2 + H_2$
$C + 2H_2 \xrightleftharpoons[k_{-1}]{k_1} CH_4$	$CH_4 + H_2O \xrightleftharpoons[k_{-1}]{k_1} CO + 3H_2$

As quantificações dos componentes dessas reações químicas podem ser realizadas através de modelos matemáticos desenvolvidos para cada componentes. Assim, os componentes reagentes e produtos podem ser modelados a partir das seguintes equações gerais.

1. Componentes Reagentes;

$$\frac{\partial(\rho_m Y_r)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \bar{v}_i Y_r) = \nabla \cdot (\rho_m D_{eff} \nabla Y_r) - v_i S_f \quad (2.14)$$

2. Componentes Produtos.

$$\frac{\partial(\rho_m Y_p)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \bar{v}_i Y_p) = \nabla \cdot (\rho_m D_{eff} \nabla Y_p) - v_i S_f \quad (2.15)$$

Onde ρ_m é a massa específica da mistura, Y_r é a fração molar dos componentes reagentes, Y_p é a fração molar dos componentes produtos e v_i é o coeficiente estequiométrico.

As Equações gerais propostas para os processos fluidodinâmicos, termodinâmicos e químicos para os gaseificadores devem ser desenvolvidas e simplificadas. As equações simplificadas geram modelos simplificados, os quais são compostos por sistemas de EDPs ou EDOs para cada processo (fluidodinâmico, termodinâmico e químico).

2.3.COMBUSTÍVEIS

Combustíveis são todas substâncias que em contato com calor e um agente oxidante (geralmente o oxigênio do ar) sofre reações químicas liberando ou absorvendo energia térmica. As reações químicas ocorrem com altas velocidades e com grande conversão de energia química em energia térmica.

Quanto ao seu estado físico, eles podem ser classificados em sólidos, líquidos e gasosos. Os combustíveis sólidos são formados por C, H₂, O₂, S, H₂O e cinzas, sendo combustíveis apenas o por C, H₂, O₂ e S. Os combustíveis líquidos podem ser minerais e não minerais. Os minerais são obtidos pela refinação do petróleo, destilação do xisto betuminoso ou hidrogenação do carvão. Dentre estes, os mais usados são gasolina, o óleo diesel e o óleo combustível. Esses combustíveis são formados de hidrocarbonetos, sendo o óleo diesel C₈H₁₇ e a gasolina C₈H₁₈. Os combustíveis líquidos não minerais são os álcoois e os óleos vegetais. Entre os álcoois, têm-se o álcool metílico e o etílico, enquanto que os óleos vegetais são formados de C, H₂, O₂ e N₂. Os combustíveis gasosos são principalmente formados por CH₄, C₂H₆, CO₂, N₂, C₃H₈ e C₄H₁₀.

2.3.1.PODER CALORÍFICO DOS COMBUSTÍVEIS

O poder calorífico de um combustível é a quantidade de energia liberada durante a combustão completa da unidade de massa (1kg) ou unidade volume (1Nm³) do combustível, podendo ser medida em kJ/kg (Kcal/kg) ou kJ/Nm³ (Kcal/Nm³). Quando se considera o calor latente de vaporização do vapor de água gerado pela reação de combustão durante a queima do combustível com ar seco, refere-se ao poder calorífico superior (PCS) e quando não se considera este calor latente está se referindo ao poder calorífico inferior (PCI). Entretanto, em instalações industriais, geralmente a temperatura dos gases de saída é maior que a temperatura de condensação, portanto, o calor latente não é possível de ser recuperado. Devido a esta consideração, o PCI é de maior aplicação para os cálculos de rendimentos e viabilidade econômica.

O poder calorífico pode ser determinado, teoricamente, através de cálculos, desde que se tenha a composição elementar do combustível e o calor de combustão dos elementos ou compostos gasosos. Este parâmetro pode ser determinado experimentalmente através de calorímetros. Por outro lado, o poder calorífico também pode ser determinado a partir da fórmula de Dulong, a qual envolve a análise elementar do combustível. Entretanto, o carbono (C) e o hidrogênio (H₂) formam compostos tais como hidrocarbonetos, álcoois e a celulose, que são à base dos combustíveis industriais. Os poderes caloríficos destes compostos não dependem somente da composição elementar do combustível, mas

também da natureza de sua constituição molecular. Desta forma, para que um átomo seja queimado é necessário que se despenda inicialmente um certo trabalho de desintegração molecular, o qual influencia no poder calorífico do conjunto. Sendo assim, a quantificação do poder calorífico pela fórmula de Dulong proporciona apenas resultados aproximados.

O cálculo do poder calorífico a partir da fórmula de Dulong está baseado na seguinte condição: o calor de combustão de um composto é igual à soma dos calores desprendidos pela combustão dos elementos que o integram. Além disso, a fórmula de Dulong assume que o oxigênio do combustível está combinado com o hidrogênio formando a água de combustão. Assim, as fórmulas de Dulong para determinar o poder calorífico dos combustíveis sólidos, líquidos e gasosos são expressas por:

1. fórmulas de Dulong para os combustíveis sólidos e líquidos;

$$PCS = 8100C + 34400\left(H - \frac{O}{8}\right) + 2500S \quad (2.16)$$

$$PCI = 8100C + 34400\left(H - \frac{O}{8}\right) + 2500S - 600W \quad (2.17)$$

$$W = 9H + U \quad (2.18)$$

Onde,

PCS = poder calorífico superior (Kcal/kg), PCI = poder calorífico inferior (Kcal/kg), C = teor de carbono (kg C/kg combustível), H = teor de hidrogênio (kg H/ kg combustível), O = teor de oxigênio (kg O/ kg combustível), S = teor de enxofre (kg S/ kg combustível), W = água formada nos produtos (kg H₂O/ kg combustível) e U = umidade.

2. fórmulas de Dulong para os combustíveis gasosos

$$PCS = 3050 CO + 3070 H_2 + 9500 CH_4 + 13950C_2H_2 + 15000C_2H_4 \quad (2.19)$$

$$PCI = 3050 CO + 2580 H_2 + 8530 CH_4 + 13500C_2H_2 + 14050C_2H_4 \quad (2.20)$$

Nas quais,

PCS = poder calorífico superior (Kcal/Nm³), PCI = poder calorífico inferior (Kcal/Nm³), CO = teor de monóxido de carbono (Nm³ CO/ Nm³ combustível), H₂ = teor de hidrogênio (Nm³ H₂/ Nm³ combustível), CH₄ = teor de metano (Nm³ CH₄/ Nm³ combustível), C₂H₂ = teor de etino (Nm³ C₂H₂/ Nm³ combustível) e C₂H₄ = teor de eteno (Nm³ C₂H₄/ Nm³ combustível). Na Tabela 2.3, encontra-se o poder calorífico de vários combustíveis.

Tabela 2.3: Valores do poder calorífico de diversos combustíveis

Combustíveis Sólidos	
Descrição do Combustível	Poder Calorífico (kcal/kg)
Carvão Antracítico	6,65-7,78
Carvão Betuminoso A	6,65-7,78
Carvão Betuminoso C	5,00-6,10
Carvão Mineral (RS) (11%)	13,20
Carvão Mineral (SC) (4,3%)	4,20
Carvão Vegetal	7,92
Carvão Coque	6,65-7,78
Lenha (Pinho) (14% Umidade)	7,20
Serragem (Pinho) (40% Umidade)	2,00
Cavaco (Pinho) (25% Umidade)	2,47
Bagaço de Cana (50% Umidade)	2,20
Bagaço de Cana fermentado (15%)	3,80
Pet	9,37
Casca de Arroz (12%)	3,30
Palha de Trigo (20%)	3,20
Palha de Amendoim (12%)	2,96
Combustíveis Líquidos	
Descrição do Combustível	Poder Calorífico (kcal/kg)
Petróleo Bruto	10,16-10,83
Gasolina	10,83-11,39
Querosene	11,00
Óleo Diesel	11,08
Óleo Combustível BPF	10,40
Óleo Combustível APF	10,53
Benzeno	10,06
Álcool Metílico	6,44
Álcool Etilico	4,76

Combustíveis Gasosos	
Descrição do Combustível	Poder Calorífico (kcal/kg)
Monóxido de Carbono (CO)	2,86
Hidrogênio (H ₂)	2,80
Metano (CH ₄)	9,00
Etano (C ₂ H ₆)	15,30
Etileno (C ₂ H ₄)	13,00
Gás de Coque	4,40
Propano	20,60
Butano	27,00
GLP (Mistura de Butano e Propano)	23,80

CAPÍTULO 3

3.MODELAGEM MATEMÁTICA

A gaseificação é um processo de conversão termoquímico para se produzir, a partir de combustíveis carbonosos, um produto gasoso com um valor calórico útil que pode ser empregado como gás combustível ou gás de síntese para posterior utilização. Esta definição exclui a combustão, já que nesta o produto gasoso final não tem valor químico nenhum. No processo de gaseificação pode ser usado diferentes tipos de agentes gaseificantes, entre eles ar, O_2 e vapor d'água (Li et al; 2001).

A conversão termoquímica modifica a estrutura química da biomassa por meio da alta temperatura. O agente de gaseificação possibilita que a corrente de alimentação seja rapidamente convertida a gás por meios de diferentes reações heterogêneas. O gás assim produzido contém CO_2 , CO , H_2 , CH_4 , H_2O , traços de hidrocarbonetos, gases inertes presentes no agente de gaseificação, várias contaminantes tais como pequenas partículas de matérias carbonoso, cinzas e alcatrão (Silva, 2012). O gás combustível (gás de síntese) produzido pode ser usado para produção de energia elétrica em turbinas a gás, motores, caldeiras, ou ainda, pode ser utilizado para a produção de várias substâncias, dentre elas, amônia, metanol, gasolina, diesel, etanol etc. (Moutinho Junior e Silva, 2011).

Em um gaseificador de leito fluidizado borbulhante, a velocidade de ascensão do fluxo de ar é cerca de $2 \text{ m/s} \leq V_{\text{ascensão}} \leq 3 \text{ m/s}$ e a expansão do leito de partículas atinge apenas a parte inferior do gaseificador. Sólidos partículas não são impulsionados fora do reator por causa da baixa velocidade. Por outro lado, em um gaseificador de leito fluidizado circulante a velocidade de ascensão do fluxo de ar é cerca de $5 \text{ m/s} \leq V_{\text{ascensão}} \leq 10 \text{ m/s}$. Sendo assim, a expansão do leito ocupa inteiramente o gaseificador e uma fração dos sólidos partículas é carregada junto com a corrente de gases que deixa o gaseificador. Esta fração é então capturada e sofre reciclo retornando ao gaseificador. Para tanto, utiliza-se de um ciclone que intercepta a corrente gasosa separando os sólidos por gravidade.

3.1.GASEIFICADOR DE LEITO FLUIDIZADO BORBULHANTE

Geralmente, os gaseificadores de leito fluidizado borbulhante (GLFB) são divididos em duas zonas principais, conforme a Figura (3.1), a zona de gasificação e a zona de freeboard. A proposta em estudo tem como finalidade estudar apenas a zona de gasificação de um gaseificador de leito fluidizado borbulhante segundo o item abaixo.

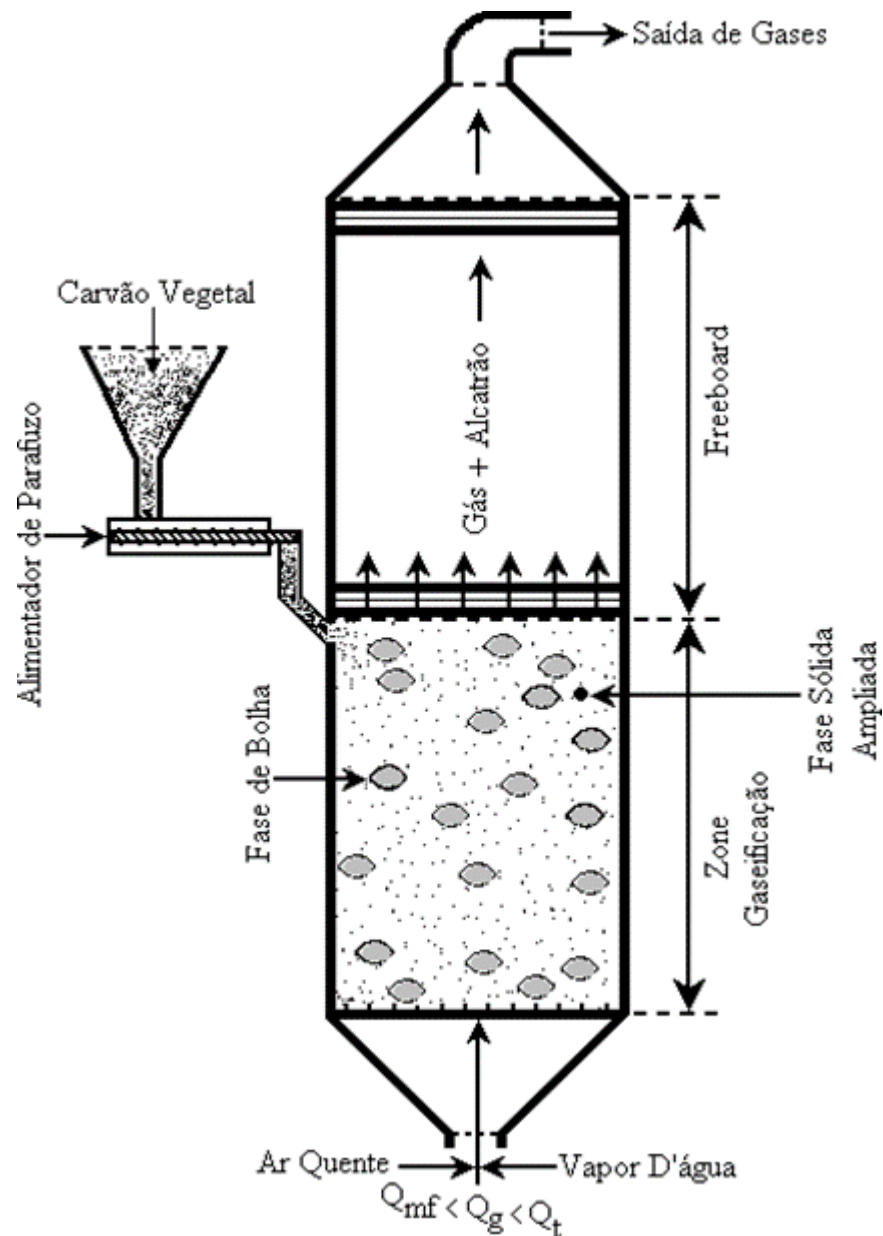


Figura 3.1: Esquema simplificado de um gaseificador de leito fluidizado borbulhante

3.2.DELIMITAÇÃO DO PROBLEMA

A proposta para este estudo tem como finalidade estudar apenas a zona de gaseificação de um gaseificador de leito fluidizado borbulhante para produção de gás combustível (2ª geração). Na Figura (3.2), mostra-se uma configuração simplificada para esta zona de gaseificação.

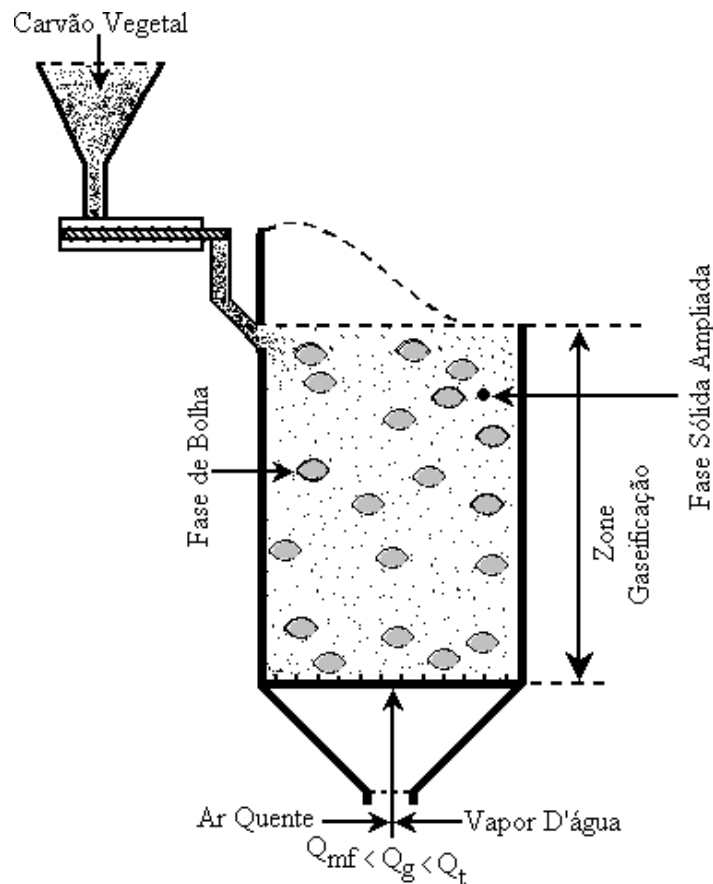


Figura 3.2: Região delimitada do gaseificador para o estudo do trabalho

3.2.1. FORMULAÇÃO DO PROBLEMA FÍSICO

Os fenômenos físicos internos são os processos que transformam dados de entrada em dados de saída. Para tanto, um modelo fenomenológico tem por objetivo reproduzir estes processos tão fielmente quanto possíveis. Os modelos fenomenológicos são baseados em equações fundamentais (leis termodinâmicas e conservação de massa, energia e momento) e equações constitutivas (correlações empíricas e semi-empíricas). No entanto, estes modelos são válidos dentro do mesmo intervalo de faixas de aplicações das correlações. Neste trabalho, o modelo físico sob consideração e coordenada é mostrado esquematicamente na Figura (3.3). Nesta Figura, apresentam-se as variáveis de entrada e saída na zona de gaseificação.

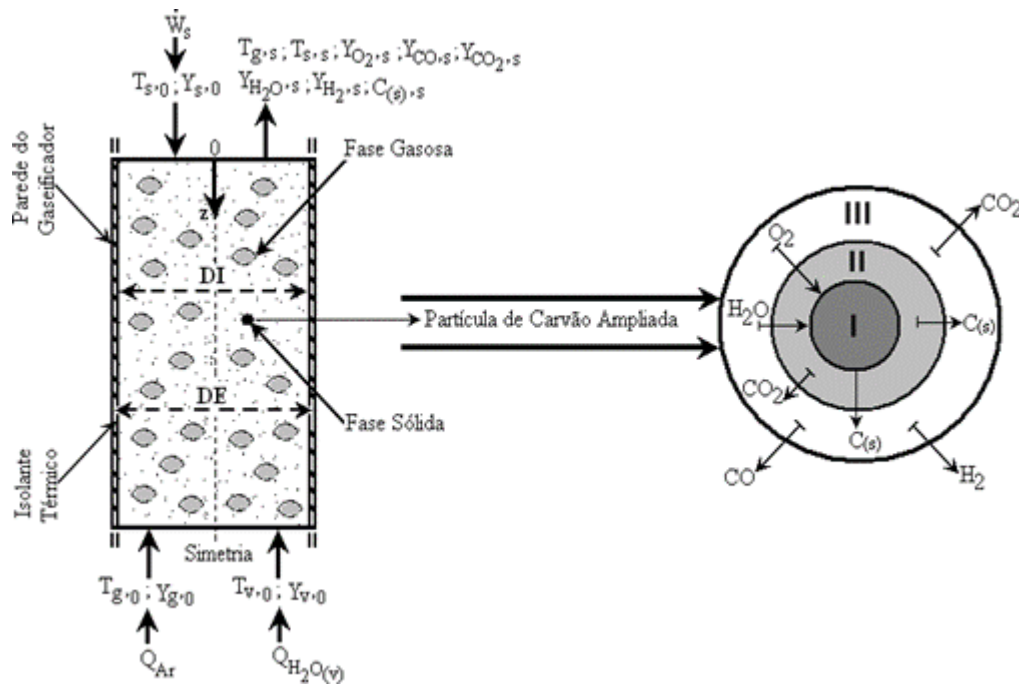


Figura 3.3: Esquema Simplificado para os Processos que Envolvem as Seguintes Zonas: (I) Zona de Secagem, (II) Zona de Pirólise e (III) Zona da Conversão do Carvão

No processo de secagem, a umidade do combustível é evaporada. O processo de pirólise separa o vapor d'água, produtos orgânicos e gases não-condensáveis do carbono residual e cinzas do combustível. Na zona (III) ocorre a conversão do carbono ou processo de gaseificação (zona de oxidação parcial + zona de redução) que reduz os produtos em gases combustíveis (Basu, 2006). Nos itens abaixo será feito um detalhamento dessas três zonas.

3.2.2. ZONA DE SECAGEM

A remoção da umidade absorve calor, de modo que um resíduo, com alto teor de umidade deve ter um tempo de residência elevado na zona de secagem para que ocorram as transferências térmicas exigidas. A quantidade de umidade do resíduo processado, que se transfere para os gases, tem influência direta no poder calorífico e na eficiência térmica global do gaseificador. Independente do gaseificador, normalmente não é possível secar a biomassa até o patamar requerido. Colocando de outra forma, a gaseificação de uma biomassa muito úmida é um tanto complicada. Então, poderia ser melhor se ter um sistema externo de secagem ou se operar com uma quantidade suficiente de biomassa seca para vários dias de operação. Apesar da sua simplicidade, a secagem de partícula sólida é uma combinação complexa de eventos envolvendo três fases: água líquida, vapor e poros da fase sólida por onde o líquido e o vapor migram.

3.2.3. ZONA DE PIRÓLISE

Pirólise ou desvolatilização é um processo bastante complexo que envolve reações, incluindo os processos de transferências de calor e massa resultando na liberação de misturas de gases orgânicos e inorgânicos da partícula para a atmosfera circundante. Geralmente, o termo pirólise é envolvido ao processo de devolatilização quando uma atmosfera inerte circunda a partícula. Geralmente, divide-se os produtos de pirólise em três grupos:

1. Gases permanentes, também chamados de gases leves, compreendendo CO_2 , CO , CH_4 e quantidades menores de H_2 e hidrocarbonetos C_2 ;
2. Líquido pirolítico (alcatrão) de composição altamente dependente da severidade do tratamento térmico, isto é, temperaturas e tempo de residência dos vapores de alcatrão na região de oxidação e a presença de carbono residual;

3. CARBONO RESIDUAL, ISTO É, O RESTANTE DO RESÍDUO SÓLIDO.

O processo global de pirólise pode ser dividido em um estágio primário e outro secundário. Assim, os fenômenos que se desencadeiam na pirólise quando a partícula sólida é aquecida em uma atmosfera inerte é destacada pelo seguinte mecanismo:

1. O calor é primeiramente transferido à partícula por condução no interior da partícula sólida, convecção no interior dos poros das partículas e convecção e irradiação da superfície da partícula;
2. A temperatura interna da partícula aumenta, causando remoção da umidade presente na partícula de biomassa e ocorrência de pré-pirólise e reações principais;
3. O calor trocado devido às reações químicas e mudanças de fases contribuem para um gradiente de temperatura como função do tempo;
4. Produtos voláteis e gasosos fluem através dos poros da partícula e participam no processo de transferência de calor;

As reações de pirólise prosseguem com uma taxa dependente da temperatura local.

3.2.4. ZONA DE OXIDAÇÃO E REDUÇÃO

Esta zona é caracterizada pela injeção de agentes gaseificantes (Ar e $\text{H}_2\text{O}(\text{v})$). Torna-se difícil se dizer o que exatamente é gaseificado na zona de conversão de um gaseificador. Quando a biomassa original chega esta zona, muito desta pode ter se tornado carbono residual, portanto é correto se assumir que

grande parte dos gases de pirólise e uma pequena parte do carbono residual queimam na presença de oxigênio desta zona. Geralmente, os processos que se desenrolam nesta zona são simplificados considerando-se reações de oxidação do carbono residual. Por outro lado, a zona de redução situa-se logo acima da zona de oxidação onde ocorre a maioria das reações que conduzem a formação do gás combustível (CO e H_2) que segue para zona de freeboard. Na Figura (3.4), mostra-se às equações químicas distribuídas depois dos passos de secagem e pirólise.

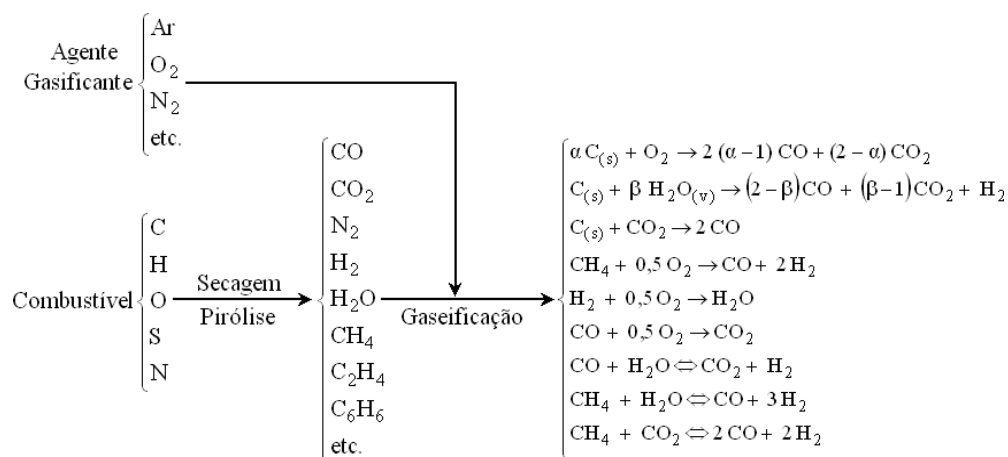


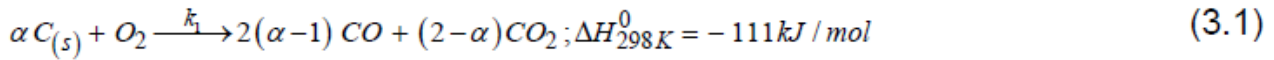
Figura 3.4: Conjunto de reações formadas na região de gaseificação a partir de biomassa, depois das etapas de secagem e pirólise

3.2.5.DESCRICÃO DO MECANISMO CINÉTICO PARA ESTA PESQUISA

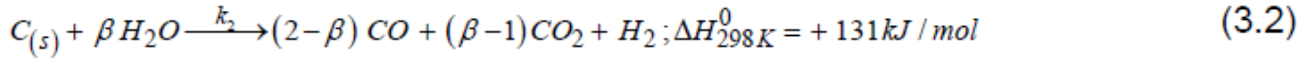
Os modelos cinéticos tratam dos mecanismos, taxas de reações químicas e as concentrações das espécies resultantes em qualquer ponto no tempo e espaço de um sistema. Estes modelos são em geral relativos a processos específicos, provendo importantes considerações relativas aos mecanismos das reações e maneiras de incrementar a taxa de uma da reação ou processo. O processo abordado aqui é limitado com apenas duas reações heterogêneas que tratam das reações de combustão e gaseificação segundo o procedimento abaixo:

As reações químicas escolhidas para este trabalho, resultantes da região de gaseificação, envolvem os componentes carbono (C(s)), oxigênio (O_2), monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono (CO_2) hidrogênio (H_2) e vapor d'água ($\text{H}_2\text{O}_{(v)}$).

Durante a gaseificação, o oxigênio do fluxo de Ar em massa é transportado para o carvão e ali ele reage heterogeneamente com o carbono presente nas partículas de carvão para formar CO e CO_2 conforme a reação química abaixo.



Por outro lado, o vapor d'água também vai reagir heterogeneamente com o carbono presente nas partículas de carvão para formar o gás de síntese (CO e H₂) segundo a reação química abaixo:



3.3.FORMULAÇÃO DO MODELO CINÉTICA

O modelo cinético apresentado aqui considera apenas duas reações heterogêneas na fase sólida conforme as reações acima (I) e (II). As taxas de reações para as equações químicas (I) e (II) são apresentadas abaixo. Os parâmetros cinéticos intrínsecos que serão usados na simulação são adotados nas Tabelas (3.1) e (3.2).

- Taxa para a reação (3.1) dada por Petersen e Werther (2005);

$$R_{r,3.1} = k_{r,3.1,0} \frac{T_s}{d_p} \exp\left(\frac{E_{a,3.1}}{RT_s}\right) C_{O_2} f_{(1)} \quad (3.3)$$

Tabela 3.1: Parâmetros cinéticos intrínsecos para a Equação (3.3) acima.

Equação (3.3)	
Parâmetros Cinéticos	Parâmetros Cinéticos
$k_{r,3.1,0} = 3,374 \left(\frac{m^3}{mol \cdot seg.} \right)$	$\alpha = \frac{1 + 2f_r}{1 + f_r}$
$E_{a,3.1} = 149,44 \left(\frac{J}{mol} \right)$	$f_r = 4,72 \times 10^{-3} \exp\left(-\frac{E_{a,3.1}}{RT_s}\right) \left(\frac{J}{mol} \right)$
$R = 8,314 \left(\frac{J}{mol \cdot K} \right)$	$E_{a,3.1} = 37,74 \left(\frac{J}{mol} \right)$
$100\mu m \leq d_p \leq 350\mu m$	$f_{(1)} = 0,5$

Taxa para a reação (3.2) dada por Petersen e Werther (2005).

$$R_{r,3.2} = \frac{k_{r,3.2} C_{H_2O} f_{(2)}}{1 + K_{3.2,H_2O} C_{H_2O} + K_{3.2,H_2} C_{H_2} + K_{3.2,CO} C_{CO}} \quad (3.4)$$

Os parâmetros cinéticos e de adsorção que aparecem na Eq. (3.4) são definidos como segue.

$$k_{r,3,2} = k_{r,3,2,0} \frac{\rho_p}{M_c} (1-X) \exp\left(-\frac{E_{r,3,2}}{RT_s}\right) \quad (3.5)$$

$$K_{3,2,H_2O} = K_{3,2,H_2O,0} \exp\left(-\frac{E_{Ad,H_2O}}{RT_s}\right) \quad (3.6)$$

$$K_{3,2,H_2} = K_{3,2,H_2,0} \exp\left(-\frac{E_{Ad,H_2}}{RT_s}\right) \quad (3.7)$$

$$K_{3,2,CO} = K_{3,2,CO,0} \exp\left(-\frac{E_{Ad,CO}}{RT_s}\right) \quad (3.8)$$

Tabela 3.2: Parâmetros cinéticos intrínsecos para a Equação (3.4) acima.

Equação (3.3)	
Parâmetros Cinéticos	Parâmetros Cinéticos
$k_{r,3,2,0} = 239,00 \left(\frac{m^3}{mol\cdot seg.}\right)$	$K_{3,2,H_2O,0} = 3,26 \times 10^{-2} \left(\frac{mol}{m^3}\right)$
$E_{a,3,2} = 129,00 \left(\frac{J}{mol}\right)$	$E_{Ad,H_2O} = 30,10 \left(\frac{J}{mol}\right)$
$X = 0,05$	$\beta = 1,2$
$f_{(2)} = 2,00$	$M_c = 12,00 \left(\frac{kg}{mol}\right)$
$K_{3,2,H_2,0} = 5,16 \times 10^{-3} \left(\frac{mol}{m^3}\right)$	$K_{3,2,CO,0} = 8,25 \times 10^{-5} \left(\frac{mol}{m^3}\right)$
$E_{Ad,H_2} = 58,80 \left(\frac{J}{mol}\right)$	$E_{Ad,CO} = 96,10 \left(\frac{J}{mol}\right)$

As reações químicas (3.1) e (3.2) envolvem reações heterogênea para o combustível carvão vegetal. Sendo assim, as taxas totais de consumo e formação, R_i , para cada componente do combustível podem ser obtidas usando a seguinte equação (Xiu et al, 2002).

$$r_i = \sum_{j=1}^n \nu_{ij} R_j \quad (3.9)$$

Onde,

$r_i \rightarrow$ taxa líquida do componente i ;

$v_{ij} \rightarrow$ Coeficiente estequiométrico da reação;

$R_j \rightarrow$ taxa de reação.

A partir das expressões de $R_{3.1}$ e $R_{3.2}$, obtém-se R_{O_2} , R_{CO} , R_{CO_2} , R_{H_2O} , R_{H_2} e $R_{C(s)}$.

- Taxa global do componente O_2 a partir da Equação (3.9);

$$r_{O_2} = -R_{r,3.1} \quad (3.10)$$

- Taxa global do componente CO a partir da Equação (3.9);

$$r_{CO} = 2(\alpha - 1) R_{r,3.1} + (2 - \beta) R_{r,3.2} \quad (3.11)$$

- Taxa global do componente CO_2 a partir da Equação (3.9);

$$r_{CO_2} = (2 - \alpha) R_{r,3.1} + (\beta - 1) R_{r,3.2} \quad (3.12)$$

- Taxa global do componente H_2O a partir da Equação (3.9);

$$r_{H_2O} = -\beta R_{r,3.2} \quad (3.13)$$

- Taxa global do componente H_2 a partir da Equação (3.9);

$$r_{H_2} = R_{r,3.2} \quad (3.14)$$

- Taxa global do componente $C(s)$ é dada por Oliveira e Silva (2012);

$$r_{C(s)} = -\alpha R_{3.1,c(s)} - R_{3.2,c(s)} \quad (3.15)$$

Onde,

$$R_{3,1,c(s)} = \frac{6}{d_p} k_{diff} C_{O_2} \quad (3.16)$$

$$k_{diff} = \frac{Sh D_{O_2}}{d_p} \quad (3.17)$$

$$Sh = 2 \varepsilon_{g,mf} \quad (3.18)$$

$$R_{3,2,c(s)} = 4,45 \exp\left(\frac{-E_{a,c(s)}}{RT_s}\right) C_{H_2O}^{0,83} \varepsilon_s \quad (3.19)$$

$$E_{a,c(s)} = 166,16 \text{ J/mol} \quad (3.20)$$

3.4.MODELAGEM PARA AS FASES GASOSA E SÓLIDA

Os processos físicos internos podem ser usados para transformar dados de entrada em dados de saída. Por isso, um modelo fenomenológico tem por objetivo reproduzir os processos internos tão fielmente quanto possíveis. Os modelos fenomenológicos são baseados em equações fundamentais (leis termodinâmicas e de balanço de massa, energia e momento) e equações constitutivas (correlações empíricas e semi-empíricas). A combinação de leis ou equações fundamentais e correlações constitutivas podem conduzir a modelos válidos. Estes modelos são válidos dentro do mesmo intervalo de faixa de aplicação das correlações. Então, estes modelos fenomenológicos trazem algumas garantias que reflitam a realidade nestes intervalos.

Os modelos matemáticos usados para os sistemas de gaseificação são importantes meios para se projetar tais sistemas sendo a partir de uma escala de laboratório à escala industrial bem como a partir de um sistema já existente extrapolando-se para condições que se queira usar. Um bom modelo ajudará a identificar a sensibilidade do desempenho de um gaseificador frente à variação de diferentes condições de operação e parâmetros de projeto. O projetista pode analisar os efeitos de muitos parâmetros com pouco ou nenhum dado experimental (Basu, 2006).

Nesta abordagem propõe-se um modelo em que está fundamentado nas equações de conservação de energia e massa, de forma que os termos geradores são descritos por submodelos físicos (transferência de energia e massa) e químicos (cinética química).

3.4.1.EQUAÇÕES SIMPLIFICADAS DO MODELO MATEMÁTICO

A modelagem matemática pode atuar de forma significativa para explicar o comportamento das temperaturas das fases gasosa e sólida no gaseificador de leito fluidizado. Para este trabalho, as

equações de balanço de energia de ambas as fases foram simplificadas com as seguintes restrições: a equação que diz respeito à fase gasosa envolve os termos referentes à acumulação térmica na fase gasosa, à convecção, à dispersão térmica, à transferência de calor gás- sólido, à transferência de calor gás-parede e a taxa de reação química das reações homogêneas global. Enquanto, a equação da fase sólida envolve os termos referentes à acumulação térmica na fase sólida, convecção térmica da fase sólida, dispersão térmica da fase sólida, à transferência de calor sólido-gás, à transferência de calor sólido-parede e taxas de reações químicas das reações heterogêneas. Por outro lado, as equações das espécies químicas incluídas envolvem os termos de acumulação das espécies químicas, convecção das espécies químicas, dispersões das espécies químicas, transferência de massa das espécies químicas e as taxas das espécies químicas nas reações consideradas para o processo. Baseado nessas hipóteses, o modelo matemático simplificado para a região de gaseificação do gaseificador de carvão sob regime de leito fluidizado borbulhante é formulado pelas equações simplificadas de transporte energia, massa e espécies químicas que descrevem o comportamento dinâmico. Assim, as equações simplificadas que formam o modelo são expressas por:

3.4.1.1.BALANÇOS DE ENERGIA

As equações de conservações de energia das fases gasosa e sólida para o processo de gaseificação são relatadas abaixo.

-Balanço de energia da fase gasosa;

$$\varepsilon_g C_{p,g} \rho_g \frac{\partial T_g}{\partial t} + \frac{4\varepsilon_g C_g \rho_g Q_g}{\pi d_c^2} \frac{\partial T_g}{\partial z} = \varepsilon_g K_g \frac{\partial^2 T_g}{\partial z^2} + Q_{gs} - Q_{gw} + \sum_{j=1}^{Nrg=0} (-\Delta H_{r,j}) R_{i,hog} \quad (3.21)$$

Onde,

$$Q_{gs} = h_{gs} S_p (T_g - T_s) \quad (3.22)$$

$$Q_{gw} = \frac{4h_{sw}}{d_c} (T_g - T_w) \quad (3.23)$$

$$\sum_{j=1}^2 (\pm \Delta H_{r,j}) R_i = 0 \quad (3.24)$$

- Condições iniciais e de contorno da fase gasosa;

$$T_g \Big|_{t=0} = T_{g,0} \quad (3.25)$$

$$K_g \frac{\partial T_g}{\partial z} \Big|_{z=0^+} = \frac{4 C_{p,g} \rho_g Q_g}{\pi d_c^2} \left(T_g \Big|_{z=0^+} - T_{g,0} \right) \quad (3.26)$$

$$\frac{\partial T_g}{\partial z} \Big|_{z=L^+} = 0 \quad (3.27)$$

- Balanço de energia da fase sólida;

$$\varepsilon_s C_{p,s} \rho_s \frac{\partial T_s}{\partial t} + \frac{4 \varepsilon_s C_{p,s} N_s \rho_s}{\pi d_c^2} \frac{\partial T_s}{\partial z} = \varepsilon_s K_s \frac{\partial^2 T_s}{\partial z^2} - Q_{sg} - Q_{sw} + \sum_{j=1}^{N_r=2} (\pm \Delta H_{r,j}) R_{i,hetg.} \quad (3.28)$$

Onde,

$$Q_{sg} = h_{sg} S_{gs} (T_s - T_g) \quad (3.29)$$

$$Q_{sw} = \frac{4 h_{sw}}{d_c} (T_s - T_w) \quad (3.30)$$

$$\sum_{j=1}^2 (\pm \Delta H_{r,j}) R_i = \Delta H_{r,3,1} R_{r,3,1} + \Delta H_{r,3,2} R_{r,3,2} \quad (3.31)$$

- Condições iniciais e de contorno da fase sólida;

$$T_s \Big|_{t=0} = T_{s,0} \quad (3.32)$$

$$K_{s,eff} \frac{\partial T_s}{\partial z} \Big|_{z=0^+} = \frac{4 \varepsilon_s N_s C_{p,s}}{\pi d_c^2} \left(T_s \Big|_{z=0^+} - T_{s,0} \right) \quad (3.33)$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial z} \Big|_{z=L^+} = 0 \quad (3.34)$$

3.4.1.2. BALANÇOS DOS COMPONENTES QUÍMICOS

As equações de conservação dos componentes químicos para o processo de gaseificação são mostradas abaixo.

- Balanço de massa para o O₂;

$$\varepsilon_g \frac{\partial Y_{O_2}}{\partial t} + \varepsilon_g \frac{4 Q_g}{\pi d_c^2} \frac{\partial Y_{O_2}}{\partial z} = \varepsilon_g D_{O_2} \frac{\partial^2 Y_{O_2}}{\partial z^2} + k_{gs} S_{gs} (Y_{O_2} - Y_C) + r_{O_2} \quad (3.35)$$

- Condições iniciais e de contorno do O₂;

$$Y_{O_2} \Big|_{t=0} = Y_{O_2,0} \quad (3.36)$$

$$D_{O_2} \frac{\partial Y_{O_2}}{\partial z} \Big|_{z=0^+} = \frac{4Q_g}{\pi d_c^2} \left(Y_{O_2} \Big|_{z=0^+} - Y_{O_2,0} \right) \quad (3.37)$$

$$\frac{\partial Y_{O_2}}{\partial z} \Big|_{z=L^+} = 0 \quad (3.38)$$

- Balanço de massa do CO;

$$\epsilon_g \frac{\partial Y_{CO}}{\partial t} + \epsilon_g \frac{4Q_g}{\pi d_c^2} \frac{\partial Y_{CO}}{\partial z} = \epsilon_g D_{CO} \frac{\partial^2 Y_{CO}}{\partial z^2} + k_{gs} S_{gs} (Y_{CO} - Y_C) + r_{CO} \quad (3.39)$$

- Condições iniciais e de contorno do CO;

$$Y_{CO} \Big|_{t=0} = Y_{CO,0} \quad (3.40)$$

$$D_{CO} \frac{\partial Y_{CO}}{\partial z} \Big|_{z=0^+} = \frac{4Q_g}{\pi d_c^2} \left(Y_{CO} \Big|_{z=0^+} - Y_{CO,0} \right) \quad (3.41)$$

$$\frac{\partial Y_{CO}}{\partial z} \Big|_{z=L^+} = 0 \quad (3.42)$$

- Balanço de massa do CO₂;

$$\epsilon_g \frac{\partial Y_{CO_2}}{\partial t} + \epsilon_g \frac{4Q_g}{\pi d_c^2} \frac{\partial Y_{CO_2}}{\partial z} = \epsilon_g D_{CO_2} \frac{\partial^2 Y_{CO_2}}{\partial z^2} + k_{gs} S_{gs} (Y_{CO_2} - Y_C) + r_{CO_2} \quad (3.43)$$

- Condições iniciais e de contorno do CO₂;

$$Y_{CO_2} \Big|_{t=0} = Y_{CO_2,0} \quad (3.44)$$

$$D_{CO_2} \frac{\partial Y_{CO_2}}{\partial z} \Big|_{z=0^+} = \frac{4Q_g}{\pi d_c^2} \left(Y_{CO_2} \Big|_{z=0^+} - Y_{CO_2,0} \right) \quad (3.45)$$

$$\frac{\partial Y_{CO_2}}{\partial z} \Big|_{z=L^+} = 0 \quad (3.46)$$

- Balanços de massa do H₂O;

$$\epsilon_g \frac{\partial Y_{H_2O}}{\partial t} + \epsilon_g \frac{4Q_g}{\pi d_c^2} \frac{\partial Y_{H_2O}}{\partial z} = \epsilon_g D_{H_2O} \frac{\partial^2 Y_{H_2O}}{\partial z^2} + k_{gs} S_{gs} (Y_{H_2O} - Y_C) + r_{H_2O} \quad (3.47)$$

- Condições iniciais e de contorno do H₂O;

$$Y_{H_2O} \Big|_{t=0} = Y_{H_2O,0} \quad (3.48)$$

$$D_{H_2O} \frac{\partial Y_{H_2O}}{\partial z} \Big|_{z=0^+} = \frac{4Q_g}{\pi d_c^2} \left(Y_{H_2O} \Big|_{z=0^+} - Y_{H_2O,0} \right) \quad (3.49)$$

$$\frac{\partial Y_{H_2O}}{\partial z} \Big|_{z=L^+} = 0 \quad (3.50)$$

- Balanço de massa do H_2 ;

$$\varepsilon_g \frac{\partial Y_{H_2}}{\partial t} + \varepsilon_g \frac{4Q_g}{\pi d_c^2} \frac{\partial Y_{H_2}}{\partial z} = \varepsilon_g D_{H_2} \frac{\partial^2 Y_{H_2}}{\partial z^2} + k_{gs} S_{gs} (Y_{H_2} - Y_C) + r_{H_2} \quad (3.51)$$

- Condições iniciais e de contorno do H_2 ;

$$Y_{H_2} \Big|_{t=0} = Y_{H_2,0} \quad (3.52)$$

$$D_{H_2} \frac{\partial Y_{H_2}}{\partial z} \Big|_{z=0^+} = \frac{4Q_g}{\pi d_c^2} \left(Y_{H_2} \Big|_{z=0^+} - Y_{H_2,0} \right) \quad (3.53)$$

$$\frac{\partial Y_{H_2}}{\partial z} \Big|_{z=L^+} = 0 \quad (3.54)$$

- Balanço de massa do $C(s)$;

$$\varepsilon_s \frac{\partial Y_{C(s)}}{\partial t} + \varepsilon_s \frac{4N_s}{\pi d_c^2} \frac{\partial Y_{C(s)}}{\partial z} = \varepsilon_s D_{C(s)} \frac{\partial^2 Y_{C(s)}}{\partial z^2} + k_{gs} S_{gs} (Y_{C(s)} - \bar{Y}_i) + r_{C(s)} \quad (3.55)$$

Condições iniciais e de contorno do $C(s)$

$$Y_{C(s)} \Big|_{t=0} = Y_{C(s),0} \quad (3.56)$$

$$D_{C(s)} \frac{\partial Y_{C(s)}}{\partial z} \Big|_{z=0^+} = \frac{4N_s}{\pi d_c^2} \left(Y_{C(s)} \Big|_{z=0^+} - Y_{C(s),0} \right) \quad (3.57)$$

$$\frac{\partial Y_{C(s)}}{\partial z} \Big|_{z=L^+} = 0 \quad (3.58)$$

CAPÍTULO 4

4. SOLUÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO

As Equações dinâmicas (3.21) a (3.58) desenvolvidas no Capítulo 3 foram deduzidas a partir das leis físicas básicas de conservação de energia e massa. Estas equações formam um modelo matemático com dispersão axial que consiste de oito (8) equações diferenciais parciais (EDPs) com suas respectivas condições de iniciais e de contornos restritas a região de gaseificação do gaseificador de leito fluidizado borbulhante. Por um lado, duas (2) destas equações têm sido desenvolvidas para descrever os comportamentos das temperaturas nas fases gasosa e sólida. Por outro lado, seis (6) destas equações foram deduzidas para analisar as espécies químicas (reagentes e produtos) das reações químicas (I) e (II) adotadas para região de gaseificação do gaseificador de leito fluidizado borbulhante. As condições de contornos empregadas para cada (EDPs) são as condições de Dankwerts. Estas condições especificam os valores das temperaturas nas fases gasosa e sólida e as frações molares das espécies químicas em ambos contornos. A escolha das condições de contornos de Dankwerts, é justificada devido os efeitos de dispersão axial (térmica e massa) terem sido considerados nas entradas do sistema físico.

4.1.MÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS

O método das diferenças finitas (MDF) tem sido desenvolvido para resolver equações diferenciais parciais (EDPs) ou equações diferenciais ordinárias (EDOs) com discretização das derivadas (parciais ou ordinárias). Particularmente, o MDF é bem adequado para resolver problemas de dispersão axial. Para ilustrar o MDF, a Figura (4.1) mostra um esquema simplificado de aproximação para os pontos da malha escolhida.

Primeiramente, a série Taylor tem usado para as variáveis escolhidas do Capítulo 3. Assim, a série Taylor foi aplicada as variáveis $T_g(z, t)$, $T_s(z, t)$, $Y_{O_2}(z, t)$, $Y_{CO}(z, t)$, $Y_{CO_2}(z, t)$, $Y_{H_2O}(z, t)$, $Y_{H_2}(z, t)$ e $Y_c(s)(z, t)$ nas vizinhanças de um ponto da malha para os casos avançado (forward) e atrasado (backward).

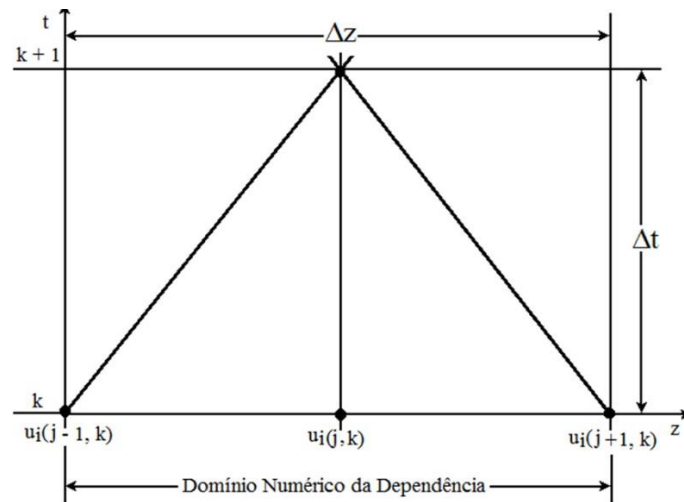


Figura 4.1: Esquema Simplificado de uma malha para o método de diferença finita

4.1.1.APROXIMAÇÃO DA PRIMEIRA E SEGUNDA DERIVADAS PARA A TEMPERATURA DA FASE GASOSA POR DIFERENÇA FINITA

- Caso avançado (forward) para a derivada de primeira ordem;

$$T_g(z+\Delta z, t) = T_g(z, t) + \frac{\partial T_g(z, t)}{\partial z}(\Delta z) + \frac{\partial^2 T_g(z, t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)^2}{2!} + \frac{\partial^3 T_g(z, t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^3}{3!} + O(\Delta z)^4 \quad (4.1)$$

Organizando a Equação (4.1), obtém:

$$\frac{\partial T_g(z, t)}{\partial z} = \frac{T_g(z+\Delta z, t) - T_g(z, t)}{\Delta z} - \frac{\partial^2 T_g(z, t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)}{2!} - \frac{\partial^3 T_g(z, t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^2}{3!} + O(\Delta z)^3 \quad (4.2)$$

Truncando na primeira derivada, tem-se:

$$\frac{\partial T_g(z, t)}{\partial z} \cong \frac{T_g(z+\Delta z, t) - T_g(z, t)}{\Delta z} + O(\Delta z) \quad (4.3)$$

Se Tomarmos Δz como um espaço de malha uniforme, obtém a seguinte relação de diferença finita para as aproximações da derivada de primeira ordem.

$$\left. \frac{\partial T_g(z, t)}{\partial z} \right|_{(j,k)} \cong \frac{1}{\Delta z} \left[(T_g)_{j+1}^k - (T_g)_j^k \right] + O(\Delta z) \quad (4.4)$$

- Caso atrasado (backward) para a derivada de primeira ordem;

$$T_g(z-\Delta z, t) = T_g(z, t) - \frac{\partial T_g(z, t)}{\partial z}(\Delta z) + \frac{\partial^2 T_g(z, t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)^2}{2!} - \frac{\partial^3 T_g(z, t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^3}{3!} + O(\Delta z)^4 \quad (4.5)$$

Organizando a Equação (4.5), obtém:

$$\frac{\partial T_g(z, t)}{\partial z} = \frac{T_g(z, t) - T_g(z-\Delta z, t)}{\Delta z} + \frac{\partial^2 T_g(z, t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)}{2!} - \frac{\partial^3 T_g(z, t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^2}{3!} + O(\Delta z)^3 \quad (4.6)$$

Truncando na primeira derivada, tem-se:

$$\frac{\partial T_g(z, t)}{\partial z} \cong \frac{T_g(z, t) - T_g(z-\Delta z, t)}{\Delta z} + O(\Delta z) \quad (4.7)$$

Se Tomarmos Δz como um espaço de malha uniforme, obtém a seguinte relação de diferença finita para as aproximações da derivada de primeira ordem.

$$\left. \frac{\partial T_g(z, t)}{\partial z} \right|_{(j,k)} \cong \frac{1}{\Delta z} \left[(T_g)_j^k - (T_g)_{j-1}^k \right] + O(\Delta z) \quad (4.8)$$

- Diferença centrada para a derivada de primeira ordem; Subtraindo a Equação (4.5) da Equação (4.1), obtém-se:

$$\frac{\partial T_g(z, t)}{\partial z} = \frac{T_g(z+\Delta z, t) - T_g(z-\Delta z, t)}{2\Delta z} - \frac{\partial^3 T_g(z, t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^2}{6} + O(\Delta z)^4 \quad (4.9)$$

Truncando na primeira derivada, tem-se:

$$\frac{\partial T_g(z, t)}{\partial z} \cong \frac{T_g(z+\Delta z, t) - T_g(z-\Delta z, t)}{2\Delta z} + O(\Delta z)^2 \quad (4.10)$$

Se Tomarmos Δz como um espaço de malha uniforme, obtém a seguinte relação de diferença finita para as aproximações da derivada de primeira ordem.

$$\left. \frac{\partial T_g(z, t)}{\partial z} \right|_{(j,k)} \cong \frac{1}{2\Delta z} \left[(T_g)_{j+1}^k - (T_g)_{j-1}^k \right] + O(\Delta z) \quad (4.11)$$

- Aproximação para segunda derivada de segunda ordem;

Adicionando a Equação (4.5) da Equação (4.1), obtém-se:

$$\left. \frac{\partial^2 T_g(z,t)}{\partial z^2} \right|_{(j,k)} = \frac{1}{(\Delta z)^2} \left[(T_g)_{j+1}^k - 2(T_g)_j^k + (T_g)_{j-1}^k \right] + O(\Delta z)^2 \quad (4.12)$$

4.1.2.APROXIMAÇÃO DA PRIMEIRA E SEGUNDA DERIVADAS PARA A TEMPERATURA DA FASE SÓLIDA POR DIFERENÇA FINITA

- Caso avançado (forward) para a derivada de primeira ordem;

$$T_s(z+\Delta z,t) = T_s(z,t) + \frac{\partial T_s(z,t)}{\partial z}(\Delta z) + \frac{\partial^2 T_s(z,t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)^2}{2!} + \frac{\partial^3 T_s(z,t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^3}{3!} + O(\Delta z)^4 \quad (4.13)$$

Organizando a Equação (4.13), obtém:

$$\frac{\partial T_s(z,t)}{\partial z} = \frac{T_s(z+\Delta z,t) - T_s(z,t)}{\Delta z} - \frac{\partial^2 T_s(z,t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)}{2!} - \frac{\partial^3 T_s(z,t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^2}{3!} + O(\Delta z)^3 \quad (4.14)$$

Truncando na primeira derivada, tem-se:

$$\frac{\partial T_s(z,t)}{\partial z} \cong \frac{T_s(z+\Delta z,t) - T_s(z,t)}{\Delta z} + O(\Delta z) \quad (4.15)$$

Se Tomarmos Δz como um espaço de malha uniforme, obtém a seguinte relação de diferença finita para as aproximações da derivada de primeira ordem.

$$\left. \frac{\partial T_s(z,t)}{\partial z} \right|_{(j,k)} \cong \frac{1}{\Delta z} \left[(T_s)_{j+1}^k - (T_s)_j^k \right] + O(\Delta z) \quad (4.16)$$

- Caso atrasado (backward) para a derivada de primeira ordem;

$$T_s(z-\Delta z,t) = T_s(z,t) - \frac{\partial T_s(z,t)}{\partial z}(\Delta z) + \frac{\partial^2 T_s(z,t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)^2}{2!} - \frac{\partial^3 T_s(z,t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^3}{3!} + O(\Delta z)^4 \quad (4.17)$$

Organizando a Equação (4.17), obtém:

$$\frac{\partial T_s(z,t)}{\partial z} = \frac{T_s(z,t) - T_s(z-\Delta z,t)}{\Delta z} + \frac{\partial^2 T_s(z,t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)}{2!} - \frac{\partial^3 T_s(z,t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^2}{3!} + O(\Delta z)^3 \quad (4.18)$$

Truncando na primeira derivada, tem-se:

$$\frac{\partial T_s(z,t)}{\partial z} \cong \frac{T_s(z,t) - T_s(z-\Delta z,t)}{\Delta z} + O(\Delta z) \quad (4.19)$$

Se Tomarmos Δz como um espaço de malha uniforme, obtém a seguinte relação de diferença finita para as aproximações da derivada de primeira ordem.

$$\left. \frac{\partial T_s(z,t)}{\partial z} \right|_{(j,k)} \cong \frac{1}{\Delta z} \left[(T_s)_j^k - (T_s)_{j-1}^k \right] + O(\Delta z) \quad (4.20)$$

Diferença centrada para a derivada de primeira ordem;

Subtraindo a Equação (4.17) da Equação (4.13), obtém-se:

$$\frac{\partial T_s(z,t)}{\partial z} = \frac{T_s(z+\Delta z,t) - T_s(z-\Delta z,t)}{2\Delta z} - \frac{\partial^3 T_s(z,t)}{\partial z^3} + O(\Delta z)^4 \quad (4.21)$$

runcando na primeira derivada, tem-se:

$$\frac{\partial T_s(z,t)}{\partial z} \cong \frac{T_s(z+\Delta z,t) - T_s(z-\Delta z,t)}{2\Delta z} + O(\Delta z)^2 \quad (4.22)$$

Se Tomarmos Δz como um espaço de malha uniforme, obtém a seguinte relação de diferença finita para as aproximações da derivada de primeira ordem.

$$\left. \frac{\partial T_s(z,t)}{\partial z} \right|_{(j,k)} \cong \frac{1}{2\Delta z} \left[(T_s)_{j+1}^k - (T_s)_{j-1}^k \right] + O(\Delta z) \quad (4.23)$$

- Aproximação para segunda derivada de segunda ordem;

Adicionando a Equação (4.17) da Equação (4.13), obtém-se:

$$\left. \frac{\partial^2 T_s(z,t)}{\partial z^2} \right|_{(j,k)} = \frac{1}{(\Delta z)^2} \left[(T_s)_{j+1}^k - 2(T_s)_j^k + (T_s)_{j-1}^k \right] + O(\Delta z)^2 \quad (4.24)$$

4.1.3.APROXIMAÇÃO DA PRIMEIRA E SEGUNDA DERIVADAS PARA O₂ O COMPONENTE QUÍMICO POR DIFERENÇA FINITA

- Caso avançado (forward) para a derivada de primeira ordem;

$$Y_{O_2}(z+\Delta z, t) = Y_{O_2}(z, t) + \frac{\partial Y_{O_2}(z, t)}{\partial z}(\Delta z) + \frac{\partial^2 Y_{O_2}(z, t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)^2}{2!} + \frac{\partial^3 Y_{O_2}(z, t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^3}{3!} + O(\Delta z)^4 \quad (4.25)$$

Organizando a Equação (4.25), obtém:

$$\frac{\partial Y_{O_2}(z, t)}{\partial z} = \frac{Y_{O_2}(z+\Delta z, t) - Y_{O_2}(z, t)}{\Delta z} - \frac{\partial^2 Y_{O_2}(z, t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)}{2!} - \frac{\partial^3 Y_{O_2}(z, t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^2}{3!} + O(\Delta z)^3 \quad (4.26)$$

Truncando na primeira derivada, tem-se:

$$\frac{\partial Y_{O_2}(z, t)}{\partial z} \cong \frac{Y_{O_2}(z+\Delta z, t) - Y_{O_2}(z, t)}{\Delta z} + O(\Delta x) \quad (4.27)$$

Se Tomarmos Δz como um espaço de malha uniforme, obtém a seguinte relação de diferença finita para as aproximações da derivada de primeira ordem.

$$\left. \frac{\partial Y_{O_2}(z, t)}{\partial z} \right|_{(j,k)} \cong \frac{1}{\Delta z} \left[(Y_{O_2})_{j+1}^k - (Y_{O_2})_j^k \right] + O(\Delta z) \quad (4.28)$$

- Caso atrasado (backward) para a derivada de primeira ordem;

$$Y_{O_2}(z-\Delta z, t) = Y_{O_2}(z, t) - \frac{\partial Y_{O_2}(z, t)}{\partial z}(\Delta z) + \frac{\partial^2 Y_{O_2}(z, t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)^2}{2!} - \frac{\partial^3 Y_{O_2}(z, t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^3}{3!} + O(\Delta z)^4 \quad (4.29)$$

Organizando a Equação (4.29), obtém:

$$\frac{\partial Y_{O_2}(z, t)}{\partial z} = \frac{Y_{O_2}(z, t) - Y_{O_2}(z-\Delta z, t)}{\Delta z} + \frac{\partial^2 Y_{O_2}(z, t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)}{2!} - \frac{\partial^3 Y_{O_2}(z, t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^2}{3!} + O(\Delta z)^3 \quad (4.30)$$

Truncando na primeira derivada, tem-se:

$$\frac{\partial Y_{O_2}(z, t)}{\partial z} \cong \frac{Y_{O_2}(z, t) - Y_{O_2}(z-\Delta z, t)}{\Delta z} + O(\Delta z) \quad (4.31)$$

Se Tomarmos Δz como um espaço de malha uniforme, obtém a seguinte relação de diferença finita para as aproximações da derivada de primeira ordem.

$$\left. \frac{\partial Y_{O_2}(z, t)}{\partial z} \right|_{(j,k)} \cong \frac{1}{\Delta z} \left[(Y_{O_2})_j^k - (Y_{O_2})_{j-1}^k \right] + O(\Delta z) \quad (4.32)$$

- Diferença centrada para a derivada de primeira ordem;

Subtraindo a Equação (4.29) da Equação (4.26), obtém-se:

$$\frac{\partial Y_{O_2}(z,t)}{\partial z} = \frac{Y_{O_2}(z+\Delta z,t) - Y_{O_2}(z-\Delta z,t)}{2\Delta z} - \frac{\partial^3 Y_{O_2}(z,t)}{\partial z^3} + O(\Delta z)^4 \quad (4.33)$$

Truncando na primeira derivada, tem-se:

$$\frac{\partial Y_{O_2}(z,t)}{\partial z} \cong \frac{Y_{O_2}(z+\Delta z,t) - Y_{O_2}(z-\Delta z,t)}{2\Delta z} + O(\Delta z)^2 \quad (4.34)$$

Se Tomarmos Δz como um espaço de malha uniforme, obtém a seguinte relação de diferença finita para as aproximações da derivada de primeira ordem.

$$\left. \frac{\partial Y_{O_2}(z,t)}{\partial z} \right|_{(j,k)} \cong \frac{1}{2\Delta z} \left[(Y_{O_2})_{j+1}^k - (Y_{O_2})_{j-1}^k \right] + O(\Delta z) \quad (4.35)$$

Aproximação para segunda derivada de segunda ordem;

Adicionando a Equação (4.29) da Equação (4.26), obtém-se:

$$\left. \frac{\partial^2 Y_{O_2}(z,t)}{\partial z^2} \right|_{(j,k)} = \frac{1}{(\Delta z)^2} \left[(Y_{O_2})_{j+1}^k - 2(Y_{O_2})_j^k + (Y_{O_2})_{j-1}^k \right] + O(\Delta z)^2 \quad (4.36)$$

4.1.4. APROXIMAÇÃO DA PRIMEIRA E SEGUNDA DERIVADAS PARA CO O COMPONENTE QUÍMICO POR DIFERENÇA FINITA

- Caso avançado (forward) para a derivada de primeira ordem;

$$Y_{CO}(z+\Delta z,t) = Y_{CO}(z,t) + \frac{\partial Y_{CO}(z,t)}{\partial z}(\Delta z) + \frac{\partial^2 Y_{CO}(z,t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)^2}{2!} + \frac{\partial^3 Y_{CO}(z,t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^3}{3!} + O(\Delta z)^4 \quad (4.37)$$

Organizando a Equação (4.37), obtém:

$$\frac{\partial Y_{CO}(z,t)}{\partial z} = \frac{Y_{CO}(z+\Delta z,t) - Y_{CO}(z,t)}{\Delta z} - \frac{\partial^2 Y_{CO}(z,t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)}{2!} - \frac{\partial^3 Y_{CO}(z,t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^2}{3!} + O(\Delta z)^3 \quad (4.38)$$

Truncando na primeira derivada, tem-se:

$$\frac{\partial Y_{CO}(z,t)}{\partial z} \cong \frac{Y_{CO}(z+\Delta z,t) - Y_{CO}(z,t)}{\Delta z} + O(\Delta x) \quad (4.39)$$

Se Tomarmos Δz como um espaço de malha uniforme, obtém a seguinte relação de diferença finita para as aproximações da derivada de primeira ordem.

$$\left. \frac{\partial Y_{CO}(z,t)}{\partial z} \right|_{(j,k)} \cong \frac{1}{\Delta z} \left[(Y_{CO})_{j+1}^k - (Y_{CO})_j^k \right] + O(\Delta z) \quad (4.40)$$

- Caso atrasado (backward) para a derivada de primeira ordem;

$$Y_{CO}(z-\Delta z,t) = Y_{CO}(z,t) - \frac{\partial Y_{CO}(z,t)}{\partial z}(\Delta z) + \frac{\partial^2 Y_{CO}(z,t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)^2}{2!} - \frac{\partial^3 Y_{CO}(z,t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^3}{3!} + O(\Delta z)^4 \quad (4.41)$$

Organizando a Equação (4.41), obtém:

$$\frac{\partial Y_{CO}(z,t)}{\partial z} = \frac{Y_{CO}(z,t) - Y_{CO}(z-\Delta z,t)}{\Delta z} + \frac{\partial^2 Y_{CO}(z,t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)}{2!} - \frac{\partial^3 Y_{CO}(z,t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^2}{3!} + O(\Delta z)^3 \quad (4.42)$$

Truncando na primeira derivada, tem-se:

$$\frac{\partial Y_{CO}(z,t)}{\partial z} \cong \frac{Y_{CO}(z,t) - Y_{CO}(z-\Delta z,t)}{\Delta z} + O(\Delta x) \quad (4.43)$$

Se Tomarmos Δz como um espaço de malha uniforme, obtém a seguinte relação de diferença finita para as aproximações da derivada de primeira ordem.

$$\left. \frac{\partial Y_{CO}(z,t)}{\partial z} \right|_{(j,k)} \cong \frac{1}{\Delta z} \left[(Y_{CO})_j^k - (Y_{CO})_{j-1}^k \right] + O(\Delta z) \quad (4.44)$$

Diferença centrada para a derivada de primeira ordem;

Subtraindo a Equação (4.41) da Equação (4.37), obtém-se:

$$\frac{\partial Y_{CO}(z,t)}{\partial z} = \frac{Y_{CO}(z+\Delta z,t) - Y_{CO}(z-\Delta z,t)}{2\Delta z} - \frac{\partial^3 Y_{CO}(z,t)}{\partial z^3} + O(\Delta z)^4 \quad (4.45)$$

Truncando na primeira derivada, tem-se:

$$\frac{\partial Y_{CO}(z,t)}{\partial z} \cong \frac{Y_{CO}(z+\Delta z,t) - Y_{CO}(z-\Delta z,t)}{2\Delta z} + O(\Delta z)^2 \quad (4.46)$$

Se Tomarmos Δz como um espaço de malha uniforme, obtém a seguinte relação de diferença finita para as aproximações da derivada de primeira ordem.

$$\left. \frac{\partial Y_{CO}(z,t)}{\partial z} \right|_{(j,k)} \cong \frac{1}{2\Delta z} \left[(Y_{CO})_{j+1}^k - (Y_{CO})_{j-1}^k \right] + O(\Delta z) \quad (4.47)$$

Aproximação para segunda derivada de segunda ordem;

Adicionando a Equação (4.41) da Equação (4.37), obtém-se:

$$\left. \frac{\partial^2 Y_{CO}(z,t)}{\partial z^2} \right|_{(j,k)} = \frac{1}{(\Delta z)^2} \left[(Y_{CO})_{j+1}^k - 2(Y_{CO})_j^k + (Y_{CO})_{j-1}^k \right] + O(\Delta z)^2 \quad (4.48)$$

4.1.5. APROXIMAÇÃO DA PRIMEIRA E SEGUNDA DERIVADAS PARA CO₂ O COMPONENTE QUÍMICO POR DIFERENÇA FINITA

- Caso avançado (forward) para a derivada de primeira ordem;

$$Y_{CO_2}(z+\Delta z, t) = Y_{CO_2}(z, t) + \frac{\partial Y_{CO_2}(z, t)}{\partial z} (\Delta z) + \frac{\partial^2 Y_{CO_2}(z, t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)^2}{2!} + \frac{\partial^3 Y_{CO_2}(z, t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^3}{3!} + O(\Delta z)^4 \quad (4.49)$$

Organizando a Equação (4.49), obtém:

$$\frac{\partial Y_{CO_2}(z, t)}{\partial z} = \frac{Y_{CO_2}(z+\Delta z, t) - Y_{CO_2}(z, t)}{\Delta z} - \frac{\partial^2 Y_{CO_2}(z, t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)}{2!} - \frac{\partial^3 Y_{CO_2}(z, t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^2}{3!} + O(\Delta z)^3 \quad (4.50)$$

Truncando na primeira derivada, tem-se:

$$\frac{\partial Y_{CO_2}(z, t)}{\partial z} \cong \frac{Y_{CO_2}(z+\Delta z, t) - Y_{CO_2}(z, t)}{\Delta z} + O(\Delta z) \quad (4.51)$$

Se Tomarmos Δz como um espaço de malha uniforme, obtém a seguinte relação de diferença finita para as aproximações da derivada de primeira ordem.

$$\left. \frac{\partial Y_{CO_2}(z, t)}{\partial z} \right|_{(j,k)} \cong \frac{1}{\Delta z} \left[(Y_{CO_2})_{j+1}^k - (Y_{CO_2})_j^k \right] + O(\Delta z) \quad (4.52)$$

- Caso atrasado (backward) para a derivada de primeira ordem;

$$Y_{CO_2}(z-\Delta z, t) = Y_{CO_2}(z, t) - \frac{\partial Y_{CO_2}(z, t)}{\partial z}(\Delta z) + \frac{\partial^2 Y_{CO_2}(z, t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)^2}{2!} - \frac{\partial^3 Y_{CO_2}(z, t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^3}{3!} + O(\Delta z)^4 \quad (4.53)$$

Organizando a Equação (4.53), obtém:

$$\frac{\partial Y_{CO_2}(z, t)}{\partial z} = \frac{Y_{CO_2}(z, t) - Y_{CO_2}(z-\Delta z, t)}{\Delta z} + \frac{\partial^2 Y_{CO_2}(z, t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)}{2!} - \frac{\partial^3 Y_{CO_2}(z, t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^2}{3!} + O(\Delta z)^3 \quad (4.54)$$

Truncando na primeira derivada, tem-se:

$$\frac{\partial Y_{CO_2}(z, t)}{\partial z} \cong \frac{Y_{CO_2}(z, t) - Y_{CO_2}(z-\Delta z, t)}{\Delta z} + O(\Delta z) \quad (4.55)$$

Se Tomarmos Δz como um espaço de malha uniforme, obtém a seguinte relação de diferença finita para as aproximações da derivada de primeira ordem.

$$\left. \frac{\partial Y_{CO_2}(z, t)}{\partial z} \right|_{(j,k)} \cong \frac{1}{\Delta z} \left[(Y_{CO_2})_j^k - (Y_{CO_2})_{j-1}^k \right] + O(\Delta z) \quad (4.56)$$

- Diferença centrada para a derivada de primeira ordem;

Subtraindo a Equação (4.53) da Equação (4.49), obtém-se:

$$\frac{\partial Y_{CO_2}(z, t)}{\partial z} = \frac{Y_{CO_2}(z+\Delta z, t) - Y_{CO_2}(z-\Delta z, t)}{2\Delta z} - \frac{\partial^3 Y_{CO_2}(z, t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^2}{6} + O(\Delta z)^4 \quad (4.57)$$

Truncando na primeira derivada, tem-se:

$$\frac{\partial Y_{CO_2}(z, t)}{\partial z} \cong \frac{Y_{CO_2}(z+\Delta z, t) - Y_{CO_2}(z-\Delta z, t)}{2\Delta z} + O(\Delta z)^2 \quad (4.58)$$

Se Tomarmos Δz como um espaço de malha uniforme, obtém a seguinte relação de diferença finita para as aproximações da derivada de primeira ordem.

$$\left. \frac{\partial Y_{CO_2}(z, t)}{\partial z} \right|_{(j,k)} \cong \frac{1}{2\Delta z} \left[(Y_{CO_2})_{j+1}^k - (Y_{CO_2})_{j-1}^k \right] + O(\Delta z) \quad (4.59)$$

- Aproximação para segunda derivada de segunda ordem;

Adicionando a Equação (4.53) da Equação (4.49), obtém-se:

$$\left. \frac{\partial^2 Y_{CO_2}(z,t)}{\partial z^2} \right|_{(j,k)} = \frac{1}{(\Delta z)^2} \left[(Y_{CO_2})_{j+1}^k - 2(Y_{CO_2})_j^k + (Y_{CO_2})_{j-1}^k \right] + O(\Delta z)^2 \quad (4.60)$$

4.1.6. APROXIMAÇÃO DA PRIMEIRA E SEGUNDA DERIVADAS PARA H₂O O COMPONENTE QUÍMICO POR DIFERENÇA FINITA

- Caso avançado (forward) para a derivada de primeira ordem;

$$Y_{H_2O}(z+\Delta z,t) = Y_{H_2O}(z,t) + \frac{\partial Y_{H_2O}(z,t)}{\partial z}(\Delta z) + \frac{\partial^2 Y_{H_2O}(z,t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)^2}{2!} + \frac{\partial^3 Y_{H_2O}(z,t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^3}{3!} + O(\Delta z)^4 \quad (4.61)$$

Organizando a Equação (4.61), obtém:

$$\frac{\partial Y_{H_2O}(z,t)}{\partial z} = \frac{Y_{H_2O}(z+\Delta z,t) - Y_{H_2O}(z,t)}{\Delta z} - \frac{\partial^2 Y_{H_2O}(z,t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)}{2!} - \frac{\partial^3 Y_{H_2O}(z,t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^2}{3!} + O(\Delta z)^3 \quad (4.62)$$

Truncando na primeira derivada, tem-se:

$$\frac{\partial Y_{H_2O}(z,t)}{\partial z} \cong \frac{Y_{H_2O}(z+\Delta z,t) - Y_{H_2O}(z,t)}{\Delta z} + O(\Delta z) \quad (4.63)$$

Se Tomarmos Δz como um espaço de malha uniforme, obtém a seguinte relação de diferença finita para as aproximações da derivada de primeira ordem.

$$\left. \frac{\partial Y_{H_2O}(z,t)}{\partial z} \right|_{(j,k)} \cong \frac{1}{\Delta z} \left[(Y_{H_2O})_{j+1}^k - (Y_{H_2O})_j^k \right] + O(\Delta z) \quad (4.64)$$

- Caso atrasado (backward) para a derivada de primeira ordem;

$$Y_{H_2O}(z-\Delta z,t) = Y_{H_2O}(z,t) - \frac{\partial Y_{H_2O}(z,t)}{\partial z}(\Delta z) + \frac{\partial^2 Y_{H_2O}(z,t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)^2}{2!} - \frac{\partial^3 Y_{H_2O}(z,t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^3}{3!} + O(\Delta z)^4 \quad (4.65)$$

Organizando a Equação (4.65), obtém:

$$\frac{\partial Y_{H_2O}(z,t)}{\partial z} = \frac{Y_{H_2O}(z,t) - Y_{H_2O}(z-\Delta z,t)}{\Delta z} + \frac{\partial^2 Y_{H_2O}(z,t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)}{2!} - \frac{\partial^3 Y_{H_2O}(z,t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^2}{3!} + O(\Delta z)^3 \quad (4.66)$$

Truncando na primeira derivada, tem-se:

$$\frac{\partial Y_{H_2O}(z,t)}{\partial z} \cong \frac{Y_{H_2O}(z,t) - Y_{H_2O}(z-\Delta z,t)}{\Delta z} + O(\Delta z) \quad (4.67)$$

Se Tomarmos Δz como um espaço de malha uniforme, obtém a seguinte relação de diferença finita para as aproximações da derivada de primeira ordem.

$$\frac{\partial Y_{H_2O}(z,t)}{\partial z} \cong \frac{Y_{H_2O}(z,t) - Y_{H_2O}(z-\Delta z,t)}{\Delta z} + O(\Delta z) \quad (4.68)$$

- Diferença centrada para a derivada de primeira ordem;

Subtraindo a Equação (4.64) da Equação (4.61), obtém-se:

$$\frac{\partial Y_{H_2O}(z,t)}{\partial z} = \frac{Y_{H_2O}(z+\Delta z,t) - Y_{H_2O}(z-\Delta z,t)}{2\Delta z} - \frac{\partial^3 Y_{H_2O}(z,t)}{\partial z^3} + O(\Delta z)^4 \quad (4.69)$$

Truncando na primeira derivada, tem-se:

$$\frac{\partial Y_{H_2O}(z,t)}{\partial z} \cong \frac{Y_{H_2O}(z+\Delta z,t) - Y_{H_2O}(z-\Delta z,t)}{2\Delta z} + O(\Delta z)^2 \quad (4.70)$$

Se Tomarmos Δz como um espaço de malha uniforme, obtém a seguinte relação de diferença finita para as aproximações da derivada de primeira ordem.

$$\left. \frac{\partial Y_{H_2O}(z,t)}{\partial z} \right|_{(j,k)} \cong \frac{1}{2\Delta z} \left[(Y_{H_2O})_{j+1}^k - (Y_{H_2O})_{j-1}^k \right] + O(\Delta z) \quad (4.71)$$

- Aproximação para segunda derivada de segunda ordem;

Adicionando a Equação (4.64) da Equação (4.61), obtém-se:

$$\left. \frac{\partial^2 Y_{H_2O}(z,t)}{\partial z^2} \right|_{(j,k)} = \frac{1}{(\Delta z)^2} \left[(Y_{H_2O})_{j+1}^k - 2(Y_{H_2O})_j^k + (Y_{H_2O})_{j-1}^k \right] + O(\Delta z)^2 \quad (4.72)$$

4.1.7. APROXIMAÇÃO DA PRIMEIRA E SEGUNDA DERIVADAS PARA H₂O COMPONENTE QUÍMICO POR DIFERENÇA FINITA

- Caso avançado (forward) para a derivada de primeira ordem;

$$Y_{H_2}(z+\Delta z, t) = Y_{H_2}(z, t) + \frac{\partial Y_{H_2}(z, t)}{\partial z}(\Delta z) + \frac{\partial^2 Y_{H_2}(z, t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)^2}{2!} + \frac{\partial^3 Y_{H_2}(z, t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^3}{3!} + O(\Delta z)^4 \quad (4.73)$$

Organizando a Equação (4.73), obtém:

$$\frac{\partial Y_{H_2}(z, t)}{\partial z} = \frac{Y_{H_2}(z+\Delta z, t) - Y_{H_2}(z, t)}{\Delta z} - \frac{\partial^2 Y_{H_2}(z, t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)}{2!} - \frac{\partial^3 Y_{H_2}(z, t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^2}{3!} + O(\Delta z)^3 \quad (4.74)$$

Truncando na primeira derivada, tem-se:

$$\frac{\partial Y_{H_2}(z, t)}{\partial z} \cong \frac{Y_{H_2}(z+\Delta z, t) - Y_{H_2}(z, t)}{\Delta z} + O(\Delta z) \quad (4.75)$$

Se Tomarmos Δz como um espaço de malha uniforme, obtém a seguinte relação de diferença finita para as aproximações da derivada de primeira ordem.

$$\left. \frac{\partial Y_{H_2}(z, t)}{\partial z} \right|_{(j,k)} \cong \frac{1}{\Delta z} \left[(Y_{H_2})_{j+1}^k - (Y_{H_2})_j^k \right] + O(\Delta z) \quad (4.76)$$

- Caso atrasado (backward) para a derivada de primeira ordem;

$$Y_{H_2}(z-\Delta z, t) = Y_{H_2}(z, t) - \frac{\partial Y_{H_2}(z, t)}{\partial z}(\Delta z) + \frac{\partial^2 Y_{H_2}(z, t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)^2}{2!} - \frac{\partial^3 Y_{H_2}(z, t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^3}{3!} + O(\Delta z)^4 \quad (4.77)$$

Organizando a Equação (4.77), obtém:

$$\frac{\partial Y_{H_2}(z, t)}{\partial z} = \frac{Y_{H_2}(z, t) - Y_{H_2}(z-\Delta z, t)}{\Delta z} + \frac{\partial^2 Y_{H_2}(z, t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)}{2!} - \frac{\partial^3 Y_{H_2}(z, t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^2}{3!} + O(\Delta z)^3 \quad (4.78)$$

Truncando na primeira derivada, tem-se:

$$\frac{\partial Y_{H_2}(z, t)}{\partial z} \cong \frac{Y_{H_2}(z, t) - Y_{H_2}(z-\Delta z, t)}{\Delta z} + O(\Delta z) \quad (4.79)$$

Se Tomarmos Δz como um espaço de malha uniforme, obtém a seguinte relação de diferença finita para as aproximações da derivada de primeira ordem.

$$\left. \frac{\partial Y_{H_2}(z, t)}{\partial z} \right|_{(j,k)} \cong \frac{1}{\Delta z} \left[(Y_{H_2})_j^k - (Y_{H_2})_{j-1}^k \right] + O(\Delta z) \quad (4.80)$$

- Diferença centrada para a derivada de primeira ordem;

Subtraindo a Equação (4.78) da Equação (4.72), obtém-se:

$$\frac{\partial Y_{H_2}(z, t)}{\partial z} = \frac{Y_{H_2}(z + \Delta z, t) - Y_{H_2}(z - \Delta z, t)}{2 \Delta z} - \frac{\partial^3 Y_{H_2}(z, t)}{\partial z^3} + O(\Delta z)^4 \quad (4.81)$$

Truncando na primeira derivada, tem-se:

$$\frac{\partial Y_{H_2}(z, t)}{\partial z} \cong \frac{Y_{H_2}(z + \Delta z, t) - Y_{H_2}(z - \Delta z, t)}{2 \Delta z} + O(\Delta z)^2 \quad (4.82)$$

Se Tomarmos Δz como um espaço de malha uniforme, obtém a seguinte relação de diferença finita para as aproximações da derivada de primeira ordem.

$$\left. \frac{\partial Y_{H_2}(z, t)}{\partial z} \right|_{(j,k)} \cong \frac{1}{2 \Delta z} \left[(Y_{H_2})_{j+1}^k - (Y_{H_2})_{j-1}^k \right] + O(\Delta z) \quad (4.83)$$

- Aproximação para segunda derivada de segunda ordem;

Adicionando a Equação (4.78) da Equação (4.72), obtém-se:

$$\left. \frac{\partial^2 Y_{H_2}(z, t)}{\partial z^2} \right|_{(j,k)} = \frac{1}{(\Delta z)^2} \left[(Y_{H_2})_{j+1}^k - 2(Y_{H_2})_j^k + (Y_{H_2})_{j-1}^k \right] + O(\Delta z)^2 \quad (4.84)$$

4.1.8. APROXIMAÇÃO DA PRIMEIRA E SEGUNDA DERIVADA PARA $C_{(s)}$ O COMPONENTE QUÍMICO POR DIFERENÇA FINITA

- Caso avançado (forward) para a derivada de primeira ordem;

$$Y_{C(s)}(z + \Delta z, t) = Y_{C(s)}(z, t) + \frac{\partial Y_{C(s)}(z, t)}{\partial z} (\Delta z) + \frac{\partial^2 Y_{C(s)}(z, t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)^2}{2!} + \frac{\partial^3 Y_{C(s)}(z, t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^3}{3!} + O(\Delta z)^4 \quad (4.85)$$

Organizando a Equação (4.85), obtém:

$$\frac{\partial Y_{C(s)}(z, t)}{\partial z} = \frac{Y_{C(s)}(z + \Delta z, t) - Y_{C(s)}(z, t)}{\Delta z} - \frac{\partial^2 Y_{C(s)}(z, t)}{\partial z^2} \frac{(\Delta z)}{2!} - \frac{\partial^3 Y_{C(s)}(z, t)}{\partial z^3} \frac{(\Delta z)^2}{3!} + O(\Delta z)^3 \quad (4.86)$$

Truncando na primeira derivada, tem-se:

$$\frac{\partial Y_{C(s)}(z, t)}{\partial z} \cong \frac{Y_{C(s)}(z + \Delta z, t) - Y_{C(s)}(z, t)}{\Delta z} + O(\Delta z) \quad (4.87)$$

Se Tomarmos Δz como um espaço de malha uniforme, obtém a seguinte relação de diferença finita para as aproximações da derivada de primeira ordem.

$$\left. \frac{\partial Y_{C(s)}(z, t)}{\partial z} \right|_{(j,k)} \cong \frac{1}{\Delta z} \left[\left(Y_{C(s)} \right)_{j+1}^k - \left(Y_{C(s)} \right)_j^k \right] + O(\Delta z) \quad (4.88)$$

- Caso atrasado (backward) para a derivada de primeira ordem;

$$Y_{C(s)}(z - \Delta z, t) = Y_{C(s)}(z, t) - \frac{\partial Y_{C(s)}(z, t)}{\partial z} (\Delta z) + \frac{\partial^2 Y_{C(s)}(z, t) (\Delta z)^2}{2!} - \frac{\partial^3 Y_{C(s)}(z, t) (\Delta z)^3}{3!} + O(\Delta z)^4 \quad (4.89)$$

Organizando a Equação (4.89), obtém:

$$\frac{\partial Y_{C(s)}(z, t)}{\partial z} = \frac{Y_{C(s)}(z, t) - Y_{C(s)}(z - \Delta z, t)}{\Delta z} + \frac{\partial^2 Y_{C(s)}(z, t) (\Delta z)}{2!} - \frac{\partial^3 Y_{C(s)}(z, t) (\Delta z)^2}{3!} + O(\Delta z)^3 \quad (4.90)$$

Truncando na primeira derivada, tem-se:

$$\frac{\partial Y_{C(s)}(z, t)}{\partial z} \cong \frac{Y_{C(s)}(z, t) - Y_{C(s)}(z - \Delta z, t)}{\Delta z} + O(\Delta z) \quad (4.91)$$

Se Tomarmos Δz como um espaço de malha uniforme, obtém a seguinte relação de diferença finita para as aproximações da derivada de primeira ordem.

$$\left. \frac{\partial Y_{C(s)}(z, t)}{\partial z} \right|_{(j,k)} \cong \frac{1}{\Delta z} \left[\left(Y_{C(s)} \right)_j^k - \left(Y_{C(s)} \right)_{j-1}^k \right] + O(\Delta z) \quad (4.92)$$

- Diferença centrada para a derivada de primeira ordem;

Subtraindo a Equação (4.89) da Equação (4.85), obtém-se:

$$\frac{\partial Y_{C(s)}(z, t)}{\partial z} = \frac{Y_{C(s)}(z + \Delta z, t) - Y_{C(s)}(z - \Delta z, t)}{2 \Delta z} - \frac{\partial^3 Y_{C(s)}(z, t)}{\partial z^3} + O(\Delta z)^4 \quad (4.93)$$

Truncando na primeira derivada, tem-se:

$$\frac{\partial Y_{C(s)}(z, t)}{\partial z} \cong \frac{Y_{C(s)}(z + \Delta z, t) - Y_{C(s)}(z - \Delta z, t)}{2 \Delta z} + O(\Delta z)^2 \quad (4.94)$$

Se Tomarmos Δz como um espaço de malha uniforme, obtém a seguinte relação de diferença finita para as aproximações da derivada de primeira ordem.

$$\left. \frac{\partial Y_{C(s)}(z, t)}{\partial z} \right|_{(j, k)} \cong \frac{1}{2 \Delta z} \left[\left(Y_{C(s)} \right)_{j+1}^k - \left(Y_{C(s)} \right)_{j-1}^k \right] + O(\Delta z) \quad (4.95)$$

- Aproximação para segunda derivada de segunda ordem;

Adicionando a Equação (4.89) da Equação (4.85), obtém-se:

$$\left. \frac{\partial^2 Y_{C(s)}(z, t)}{\partial z^2} \right|_{(j, k)} = \frac{1}{(\Delta z)^2} \left[\left(Y_{C(s)} \right)_{j+1}^k - 2 \left(Y_{C(s)} \right)_j^k + \left(Y_{C(s)} \right)_{j-1}^k \right] + O(\Delta z)^2 \quad (4.96)$$

4.2.EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS E SUAS CONDIÇÕES DE CONTORNO

O modelo matemático apresentado no Capítulo 3 tem sido formado por um Sistema de EDPs, que requer condições de contornos estável na entrada e saída do sistema da região de gaseificação do Gaseificador leito fluidizado borbulhante (GLFB). As condições de contornos adotadas foram às condições do Danckwerts (Danckwerts, 1953). Estas condições de contornos do Danckwerts são definidas por gradientes espaciais das temperaturas nas fases gasosa e sólida e das frações molares das espécies químicas na entrada e saída da região de gaseificação do GLFB.

Para usar as condições de contornos do Danckwerts, deverá tomar cuidado no contorno de entrada (nó em $z = 0+$) quanto aos pontos na malha $(j + 1, k)$ e $(j - 1, k)$ como tem sido mostrado na Figura (4.1). Para contornar este problema, no contorno de entrada, usa-se as expressões deduzidas para os casos avançado (forward) e atrasado (backward) para cada uma das variáveis conforme o procedimento seguinte:

4.2.1.EQUAÇÃO DIFERENCIAL ORDINÁRIA DA TEMPERATURA DA FASE GASOSA E SUAS CONDIÇÕES DE CONTORNOS

A Equação (3.17) foi discretizada usando as Equações (4.11) e (4.12), obtendo assim a seguinte equação diferencial ordinária (EDO).

$$\left. \frac{dT_g}{dt} \right|_{(i,j)} = \alpha_{g,1} (T_g)_{j+1}^k - \alpha_{g,2} (T_g)_{j-1}^k - \alpha_{g,3} (T_g)_j^k - \alpha_{g,4} (T_s)_j^k + \alpha_{g,5} (T_w)_j^k \quad (4.97)$$

As temperaturas $(T_g)^k_{j+1}$ e $(T_g)^k_{j-1}$ nos pontos da malha, usando a condição contorno dada pela Equação (3.22), têm sido obtidas usando as Equações (4.4) e (4.8), assim expressas:

$$(T_g)_{j+1}^k = \alpha_{g,7} (T_g)_j^k + \alpha_{g,8} \quad (4.98)$$

$$(T_g)_{j-1}^k = \alpha_{g,9} (T_g)_j^k - \alpha_{g,10} \quad (4.99)$$

Introduzindo as Equações (4.98) e (4.99) na Equação (4.97) foi obtida a seguinte EDO em função apenas de $(T_i)^k_j$, $i = g, s$ e w .

$$\left. \frac{dT_g}{dt} \right|_{(i,j)} = \alpha_{g,11} (T_g)_j^k - \alpha_{g,4} (T_s)_j^k + \alpha_{g,5} (T_w)_j^k + \alpha_{g,12} \quad (4.100)$$

Os coeficientes de $\alpha_{g,1}$, a $\alpha_{g,12}$ das Equações (4.98) - (4.100) têm sido apresentados no apêndice (A).

4.2.2.EQUAÇÃO DIFERENCIAL ORDINÁRIA DA TEMPERATURA DA FASE SOLIDA E SUAS CONDIÇÕES DE CONTORNOS

A Equação (3.24) foi discretizada usando as Equações (4.23) e (4.24), tendo a seguinte (EDO).

$$\left. \frac{dT_s}{dt} \right|_{(i,j)} = \beta_{s,1} (T_s)_{j+1}^k + \beta_{s,2} (T_s)_{j-1}^k - \beta_{s,3} (T_s)_j^k + \beta_{s,4} (T_g)_j^k + \beta_{s,5} (T_w)_j^k + \beta_{s,6} (C_{O_2})_j^k + \beta_{s,7} \frac{(C_{H_2O})_j^k}{1 + K_{2,H_2O} (C_{H_2O})_j^k + K_{2,H_2} (C_{H_2})_j^k + K_{2,CO} (C_{CO})_j^k} \quad (4.101)$$

As temperaturas $(T_s)_{j+1}^k$ e $(T_s)_{j-1}^k$ nos pontos da malha, usando a condição contorno dada pela Equação (3.29), foram obtidas usando as Equações (4.16) e (4.20), assim expressas:

$$(T_s)_{j+1}^k = \beta_{s,9}(T_s)_j^k - \beta_{s,10} \quad (4.102)$$

$$(T_s)_{j-1}^k = \beta_{s,11}(T_s)_j^k + \beta_{s,12} \quad (4.103)$$

Implementando as Equações (4.102) e (4.103) na Equação (4.101) tem sido obtida a seguinte EDO em função de $(T_i)_j^k$, $i = s, g \text{ e } w$; $(C_i)_j^k$, $i = O_2, H_2O, H_2 \text{ e } CO$.

$$\left. \frac{dT_s}{dt} \right|_{(i,j)} = \beta_{s,13}(T_s)_j^k + \beta_{s,4}(T_g)_j^k + \beta_{s,5}(T_w)_j^k + \beta_{s,6}(C_{O_2})_j^k + \beta_{s,7} \frac{(C_{H_2O})_j^k}{(P_i)_j^k} + \beta_{s,14} \quad (4.104)$$

Onde,

$$(P_i)_j^k = 1 + K_{2,H_2O}(C_{H_2O})_j^k + K_{2,H_2}(C_{H_2})_j^k + K_{2,CO}(C_{CO})_j^k$$

Os coeficientes de $\beta_{s,1}$ a $\beta_{s,14}$ das Equações (4.101) - (4.104) têm sido relatados no apêndice (B).

4.2.3.EQUAÇÃO DIFERENCIAL ORDINÁRIA DO COMPONENTE O_2 E SUAS CONDIÇÕES DE CONTORNOS

A Equação (3.31) foi discretizada usando as Equações (4.35) e (4.36), obtendo a seguinte (EDO).

$$\left. \frac{dY_{O_2}}{dt} \right|_{(i,j)} = \gamma_{O_2,1}(Y_{O_2})_{j+1}^k + \gamma_{O_2,2}(Y_{O_2})_{j-1}^k + \gamma_{O_2,3}(Y_{O_2})_j^k - \gamma_{O_2,4}(Y_C)_j^k - \gamma_{O_2,5}(C_{O_2})_j^k \quad (4.105)$$

As frações molares $(Y_{O_2})_{j+1}^k$ e $(Y_{O_2})_{j-1}^k$ nos pontos da malha, usando a condição contorno dada pela Equação (3.33), foram obtidas usando as Equações (4.28) e (4.32), assim expressas:

$$(Y_{O_2})_{j+1}^k = \gamma_{O_2,7} (Y_{O_2})_j^k - \gamma_{O_2,8} \quad (4.106)$$

$$(Y_{O_2})_{j-1}^k = \gamma_{O_2,9} (Y_{O_2})_j^k - \gamma_{O_2,10} \quad (4.107)$$

Aplicando as Equações (4.106) e (4.107) na Equação (4.105) obtém-se a seguinte EDO, assim expressa.

$$\left. \frac{dY_{O_2}}{dt} \right|_{(i,j)} = \gamma_{O_2,11} (Y_{O_2})_j^k - \gamma_{O_2,4} (Y_C)_j^k - \gamma_{O_2,5} (C_{O_2})_j^k + \gamma_{O_2,12} \quad (4.108)$$

Os coeficientes de $\gamma_{O_2,1}$ a $\gamma_{O_2,12}$ das Equações (4.105) a (4.108) têm sido confirmados no apêndice (C).

4.2.4.EQUAÇÃO DIFERENCIAL ORDINÁRIA DO COMPONENTE CO E SUAS CONDIÇÕES DE CONTORNOS

A Equação (3.35) foi discretizada usando as Equações (4.47) e (4.48), obtendo a seguinte (EDO).

$$\left. \frac{dY_{CO}}{dt} \right|_{(i,j)} = \nu_{CO,1} (Y_{CO})_{j+1}^k + \nu_{CO,2} (Y_{CO})_{j-1}^k + \nu_{CO,3} (Y_{CO})_j^k - \nu_{CO,4} (Y_C)_j^k + \nu_{CO,5} (C_{O_2})_j^k - \nu_{CO,6} \frac{(Y_{H_2O})_j^k}{(P_i)_j^k} \quad (4.109)$$

As frações molares $(Y_{CO})_{j+1}^k$ e $(Y_{CO})_{j-1}^k$ nos pontos da malha, usando a condição contorno dada pela Equação (3.37), foram obtidas usando as Equações (4.40) e (4.44), assim expressas:

$$(Y_{CO})_{j+1}^k = \nu_{CO,8} (Y_{CO})_j^k - \nu_{CO,9} \quad (4.110)$$

$$(Y_{CO})_{j-1}^k = \nu_{CO,10} (Y_{CO})_j^k + \nu_{CO,11} \quad (4.111)$$

Usando as Equações (4.110) e (4.111) na Equação (4.109) obtém-se a seguinte EDO, assim expressa.

$$\left. \frac{dY_{CO}}{dt} \right|_{(i,j)} = \nu_{CO,12} (Y_{CO})_j^k - \nu_{CO,4} (Y_C)_j^k + \nu_{CO,5} (C_{O_2})_j^k + \nu_{CO,6} \frac{(C_{H_2O})_j^k}{(P_i)_j^k} + \nu_{CO,13} \quad (4.112)$$

Os coeficientes de $\nu_{CO_2,1}$ a $\nu_{CO_2,13}$ das Equações (4.106) a (4.109) têm sido mostrados no apêndice (D).

4.2.5.EQUAÇÃO DIFERENCIAL ORDINÁRIA DO COMPONENTE CO₂ E SUAS CONDIÇÕES DE CONTORNOS

A Equação (3.38) foi discretizada usando as Equações (4.59) e (4.60), obtendo a seguinte (EDO).

$$\left. \frac{dY_{CO_2}}{dt} \right|_{(j,k)} = \vartheta_{CO_2,1} (Y_{CO_2})_{j+1}^k + \vartheta_{CO_2,2} (Y_{CO_2})_{j-1}^k + \vartheta_{CO_2,3} (Y_{CO_2})_j^k - \vartheta_{CO_2,4} (Y_C)_j^k + \vartheta_{CO_2,5} (C_{O_2})_j^k + \vartheta_{CO_2,6} \frac{(C_{H_2O})_j^k}{(P_i)_j^k} \quad (4.113)$$

As frações molares $(Y_{CO_2})_{j+1}^k$ e $(Y_{CO_2})_{j-1}^k$ nos pontos da malha, usando a condição contorno dada pela Equação (3.40), foram obtidas usando as Equações (4.52) e (4.56), assim expressas:

$$(Y_{CO_2})_{j+1}^k = \vartheta_{CO_2,8} (Y_{CO_2})_j^k - \vartheta_{CO_2,9} \quad (4.114)$$

$$(Y_{CO_2})_{j-1}^k = \vartheta_{CO_2,10} (Y_{CO_2})_j^k + \vartheta_{CO_2,11} \quad (4.115)$$

Utilizando as Equações (4.114) e (4.115) na Equação (4.113) tem-se a seguinte EDO, assim expressa.

$$\left. \frac{dY_{CO_2}}{dt} \right|_{(j,k)} = \vartheta_{CO_2,12} (Y_{CO_2})_j^k - \vartheta_{CO_2,4} (Y_C)_j^k + \vartheta_{CO_2,5} (C_{O_2})_j^k + \vartheta_{CO_2,6} \frac{(C_{H_2O})_j^k}{(P_i)_j^k} + \vartheta_{CO_2,13} \quad (4.116)$$

Os coeficientes de $\vartheta_{CO_2,1}$ a $\vartheta_{CO_2,13}$ das Equações (4.114) a (4.117) têm sido reportados no apêndice (E).

4.2.6.EQUAÇÃO DIFERENCIAL ORDINÁRIA DO COMPONENTE H₂O E SUAS CONDIÇÕES DE CONTORNOS

A Equação (3.42) foi discretizada usando as Equações (4.70) e (4.71), obtendo a seguinte (EDO).

$$\left. \frac{dY_{H_2O}}{dt} \right|_{(j,k)} = \tau_{H_2O,1} (Y_{H_2O})_{j+1}^k + \tau_{H_2O,2} (Y_{H_2O})_{j-1}^k + \tau_{H_2O,3} (Y_{H_2O})_j^k - \tau_{H_2O,4} (Y_C)_j^k - \tau_{H_2O,5} \frac{(C_{H_2O})_j^k}{(P_i)_j^k} \quad (4.117)$$

As frações molares $(Y_{H_2O})_{j+1}^k$ e $(Y_{H_2O})_{j-1}^k$ nos pontos da malha, usando a condição contorno dada pela Equação (3.44), foram obtidas usando as Equações (4.63) e (4.67), assim expressas:

$$(Y_{H_2O})_{j+1}^k = \tau_{H_2O,7} (Y_{H_2O})_j^k - \tau_{H_2O,8} \quad (4.118)$$

$$(Y_{H_2O})_{j-1}^k = \tau_{H_2O,9} (Y_{H_2O})_j^k + \tau_{H_2O,10} \quad (4.119)$$

Utilizando as Equações (4.118) e (4.119) na Equação (4.117) tem-se a seguinte EDO, assim expressa.

$$\left. \frac{dY_{H_2O}}{dt} \right|_{(j,k)} = \tau_{H_2O,11} (Y_{H_2O})_j^k - \tau_{H_2O,4} (Y_C)_j^k - \tau_{H_2O,5} \frac{(C_{H_2O})_j^k}{(P_i)_j^k} + \tau_{H_2O,12} \quad (4.120)$$

Os coeficientes de $\tau_{H_2O,1}$ a $\tau_{H_2O,12}$ das Equações (4.118) a (4.121) têm sido apresentados no apêndice (F).

4.2.7.EQUAÇÃO DIFERENCIAL ORDINÁRIA DO COMPONENTE H_2 E SUAS CONDIÇÕES DE CONTORNOS

A Equação (3.46) foi discretizada usando as Equações (4.84) e (4.85), obtendo a seguinte (EDO).

$$\left. \frac{dY_{H_2}}{dt} \right|_{(j,k)} = \psi_{H_2,1} (Y_{H_2})_{j+1}^k + \psi_{H_2,2} (Y_{H_2})_{j-1}^k + \psi_{H_2,3} (Y_{H_2})_j^k - \psi_{H_2,4} (Y_C)_j^k + \psi_{H_2,5} \frac{(C_{H_2O})_j^k}{(P_i)_j^k} \quad (4.121)$$

As frações molares $(Y_{H_2})_{j+1}^k$ e $(Y_{H_2})_{j-1}^k$ nos pontos da malha, usando a condição contorno dada pela Equação (3.48), foram obtidas usando as Equações (4.77) e (4.81), assim expressas:

$$\left(Y_{H_2}\right)_{j+1}^k = \psi_{H_2,7} \left(Y_{H_2}\right)_j^k - \psi_{H_2,8} \quad (4.122)$$

$$\left(Y_{H_2}\right)_{j-1}^k = \psi_{H_2,9} \left(Y_{H_2}\right)_j^k + \psi_{H_2,10} \quad (4.123)$$

Usando as Equações (4.122) e (4.123) na Equação (4.121) tem-se a seguinte EDO como segue.

$$\left. \frac{dY_{H_2}}{dt} \right|_{(j,k)} = \psi_{H_2,11} \left(Y_{H_2}\right)_j^k - \psi_{H_2,4} \left(Y_C\right)_j^k + \psi_{H_2,5} \frac{\left(C_{H_2O}\right)_j^k}{\left(P_i\right)_j^k} + \psi_{H_2,12} \quad (4.124)$$

Os coeficientes de $\psi_{H_2,1}$ a $\psi_{H_2,12}$ Equações (4.122) a (4.125) têm sido apresentados no apêndice (G).

4.2.8.EQUAÇÃO DIFERENCIAL ORDINÁRIA DO COMPONENTE $C_{C(s)}$ E SUAS CONDIÇÕES DE CONTORNOS

A Equação (3.50) foi discretizada usando as Equações (4.96) e (4.97), obtendo a seguinte (EDO).

$$\begin{aligned} \left. \frac{dY_{C(s)}}{dt} \right|_{(j,k)} &= \sigma_{C(s),1} \left(Y_{C(s)}\right)_{j+1}^k + \sigma_{C(s),2} \left(Y_{C(s)}\right)_{j-1}^k - \sigma_{C(s),3} \left(Y_{C(s)}\right)_j^k - \sigma_{C(s),4} \left(\bar{Y}_i\right)_j^k \\ &+ \sigma_{C(s),5} \left(C_{O_2}\right)_j^k - 4,45 \exp \left[\frac{-E_a}{R(T_s)_j^k} \right] \left(C_{H_2O}^{0,83}\right)_j^k \end{aligned} \quad (4.125)$$

$$\left(Y_{C(s)}\right)_{j+1}^k \text{ e } \left(Y_{C(s)}\right)_{j-1}^k$$

As frações molares nos pontos da malha, usando a condição contorno dada pela Equação (3.52), foram obtidas usando as Equações (4.89) e (4.93), assim expressas:

$$\left(Y_{C(s)}\right)_{j+1}^k = \sigma_{C(s),7} \left(Y_{C(s)}\right)_j^k - \sigma_{C(s),8} \quad (4.126)$$

$$\left(Y_{C(s)}\right)_{j-1}^k = \sigma_{C(s),9} \left(Y_{C(s)}\right)_j^k + \sigma_{C(s),10} \quad (4.127)$$

Introduzindo as Equações (4.126) e (4.127) na Equação (4.125) tem-se a seguinte EDO como segue.

$$\left. \frac{dY_{C(s)}}{dt} \right|_{(j,k)} = \sigma_{C(s),11} \left(Y_{C(s)} \right)_j^k - \sigma_{C(s),4} \left(\bar{Y}_i \right)_j^k + \sigma_{C(s),5} \left(C_{O_2} \right)_j^k - 4,45 \exp \left[\frac{-E_a}{R \left(T_s \right)_j^k} \right] - \sigma_{C(s),12} \quad (4.128)$$

O sistema de EDOs formados pelas Equações (4.100), (4.104), (4.108), (4.112), (4.116), (4.120), (4.124) (4.128) tem sido resolvido usando o método Runge-Kutta Gill segundo os Apêndices (A e J).

CAPÍTULO 5

RESULTADOS E DISCUSSÕES

O modelo matemático (Equações 3.1 a 3.51) desenvolvido para a região de gaseificação do gaseificador de leito fluidizado borbulhante em contracorrente conduziu a resultados do comportamento das variáveis de processo desta região. O modelo foi desenvolvido para analisar a temperatura da fase gasosa (T_g), temperatura da fase sólida (T_s) bem como as frações molares para as espécies químicas O_2 , CO , CO_2 , H_2O , H_2 e $C(s)$. O modelo proposto neste trabalho serviu para estudar a evolução das temperaturas e das espécies químicas em relação à distância axial da região de gaseificação em diferentes instantes de tempo. Foi também usado um estudo de sensibilidade usando a vazão da fase gasosa para verificar a produção de CO e H_2 .

Na simulação das variáveis do processo em estudo, o código computacional foi alimentado com os parâmetros apresentados na Tabela 5.1. Nesta Tabela, mostram-se os parâmetros operacionais na região de gaseificação do gaseificador de leito fluidizado borbulhante, os coeficientes de transferência de massa e calor e as propriedades físicas da fase gasosa. Os parâmetros da Tabela 5.1 têm sido admitidos como valores fixos e outros foram calculados a partir de correlações.

Nas Figuras de (1) a (10), o comportamento das variáveis T_g , T_s e frações molares para as espécies químicas O_2 , CO , CO_2 , H_2O , H_2 e $C(s)$ representa o quantitativo destas variáveis na região de gaseificação do gaseificador de leito fluidizado borbulhante. Convém salientar, que foi realizada validação da temperatura da fase gasosa (T_g) e da concentração do monóxido de carbono (CO) através de comparações com dados da literatura.

Uma análise de sensibilidade foi realizada para as temperaturas das fases gasosa e sólida usando a temperatura de entrada da fase gasosa bem como a otimização da produção de hidrogênio usando a vazão de ar na entrada do sistema. Os resultados obtidos foram fundamentais para analisar as variáveis em estudo na região de gaseificação do gaseificador de leito fluidizado borbulhante.

Tabela 5.1: Valores de entrada das condições de operações, propriedades das fases gasosa e sólida usados na simulação (Ross et al., 2004; Petersen e Werther, 2005).

Condições de Operações	
Propriedades	Valores
Temperatura inicial do gás ($T_{g,0}$), °C	450
Temperatura inicial do sólido ($T_{s,0}$), °C	470
Temperatura inicial da parede (T_w), °C	470
Pressão (P), kPa	101
Vazão de gás (Q_g), m ³ s ⁻¹	9,87x10 ⁻¹
Vazão de sólido (N_s), kg s ⁻¹	6,39x10 ⁻⁵
Vazão de vapor de água (Q_v), m ³ s ⁻¹	0,334
Fração molar inicial do O ₂ ($Y_{O_2,0}$), (-)	1,78x10 ⁻³
Fração molar inicial do CO ($Y_{CO,0}$), (-)	0,28
Fração molar inicial do CO ₂ ($Y_{CO_2,0}$), (-)	0,00
Fração molar inicial da H ₂ O ($Y_{H_2O,0}$), (-)	0,00
Fração molar inicial do H ₂ ($Y_{H_2,0}$), (-)	0,20
Fração molar inicial do C _(s) ($Y_{C(s),0}$), (-)	0,00
Diâmetro da região de gaseificação (d_c), m	0,45
Propriedades da Fase Gasosa	
Propriedades	Valores
Fração de vazio da fase gasosa (ε_g), (-)	0,43
Cap. calorífica da fase gasosa ($C_{p,g}$), J kg ⁻¹ K ⁻¹	1,092x10 ³
Densidade da fase gasosa (ρ_g), kg m ⁻³	0,456
Cond. térmica da fase gasosa (K_g), W m ⁻¹ K ⁻¹	5,63x10 ⁻²
C. de transf. de calor gás-sólido (h_{gs}), W m ⁻² K ⁻¹	8,41x10 ²
Área específica gás-sólido (S_{gs}), m ⁻¹	4,37x10 ³
C. de transf. Conv. gás-parede, (h_{gw}), W m ⁻² K ⁻¹	1,85x10 ²
Coeficiente de difusão para O ₂ (D_{O_2}), m ² s ⁻¹	2,02x10 ⁻⁵
Coeficiente de difusão para CO (D_{CO}), m ² s ⁻¹	2,46x10 ⁻⁵
Coeficiente de difusão para CO ₂ (D_{CO_2}), m ² s ⁻¹	1,38x10 ⁻⁵

Propriedades da Fase Gasosa	
Propriedades	Valores
C. de difusão para H ₂ O (D _{H₂O}), m ² s ⁻¹	2,18x10 ⁻⁵
C. de difusão para H ₂ (D _{H₂}), m ² s ⁻¹	4,13x10 ⁻⁵
C. de difusão para C _(s) (D _{C(s)}), m ² s ⁻¹	1,82x10 ⁻⁵
C. de Transferência de massa (k _{gs}), m s ⁻¹	6,85x10 ⁻³
Propriedades da Fase Sólida	
Propriedades	Valores
Fração de vazio da fase sólida (ε _s), (-)	0,63
Cap. calorífica do carvão (C _{p, s}), J kg ⁻¹ K ⁻¹	1,10x10 ³
Densidade da fase sólida (ρ _s), kg m ⁻³	2,50x10 ³
Cond. térmica da fase sólida (K _s), W m ⁻¹ K ⁻¹	7,13x10 ²
Calor de Reações	
Propriedades	Valores
Calor de reação, H _{r, 3.1} (850°C), kJ mol ⁻¹	+ 40.635
Calor de reação, H _{r, 3.2} (850°C), kJ mol ⁻¹	+ 429.311

A Figura (5.1) tem mostrado por meio de comparação uma verificação para validar a temperatura do gás ao longo da distância axial da região gaseificação do gaseificador de fluidizado borbulhante usando dados da literatura. A partir de $\pm 0,25$, os resultados deste trabalho são confirmados com os resultados estabelecidos por Ross et al., (2004).

A Figura (5.2) mostra os perfis das temperaturas (T_g e T_s) para as fases gasosa e sólida ao longo da distância axial da região gaseificação do gaseificador de fluidizado borbulhante. Depois $\pm 0,24$ m a temperatura do gás excede a temperatura do sólido. Este fenômeno de a temperatura do gás exceder a temperatura do sólido após $\pm 0,25$ m é devido à geração líquida de gás (em número de moles) na fase sólida em consequência das reações de devolatização do sólido, homogêneas e heterogêneas. As T_g e T_s têm alcançado um valor máximo constante a partir de $\pm 0,25$ m satisfazendo as condições de contorno dadas pelas Equações (3.22) e (3.29).

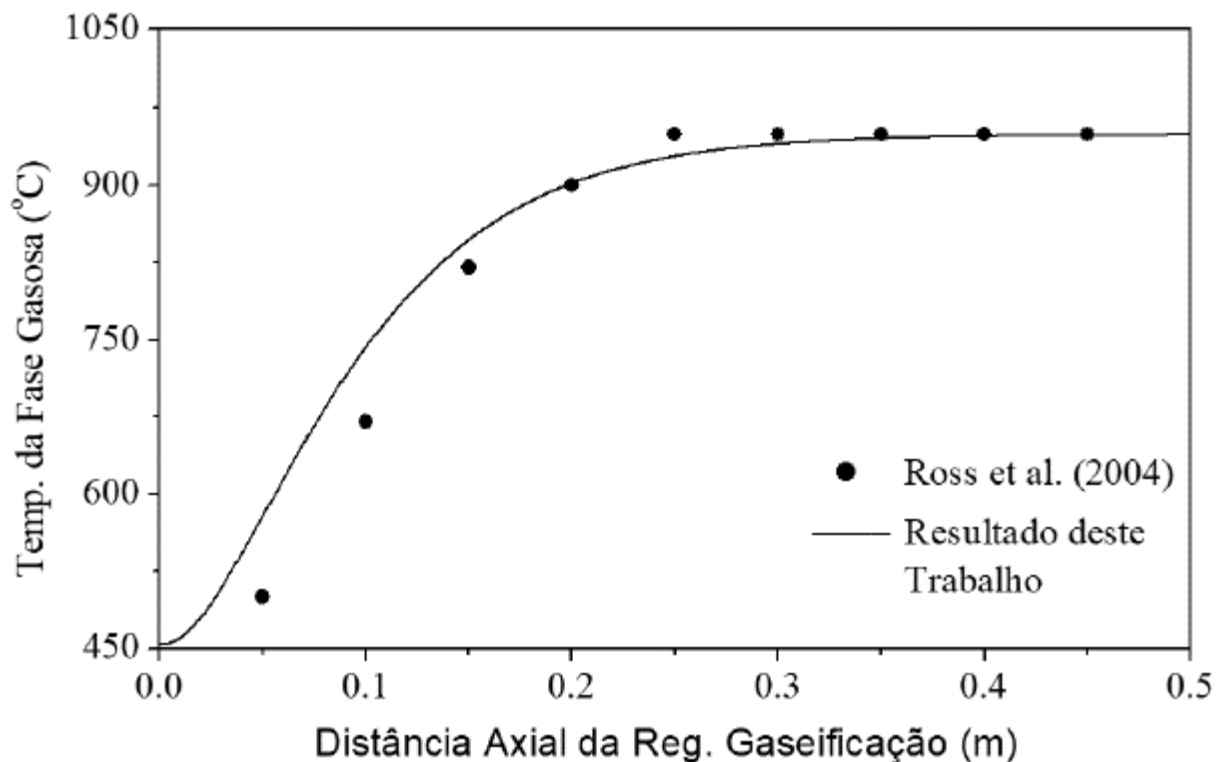


Figura 5.1: Comparações dos perfis de temperaturas do gás preditos e os resultados de Ross et al., (2004) nas seguintes condições: $t = 5 \text{ seg}$, $Q_g = 8,795 \times 10^{-1} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, $T_g = 450^\circ\text{C}$ e $T_s = 470^\circ\text{C}$

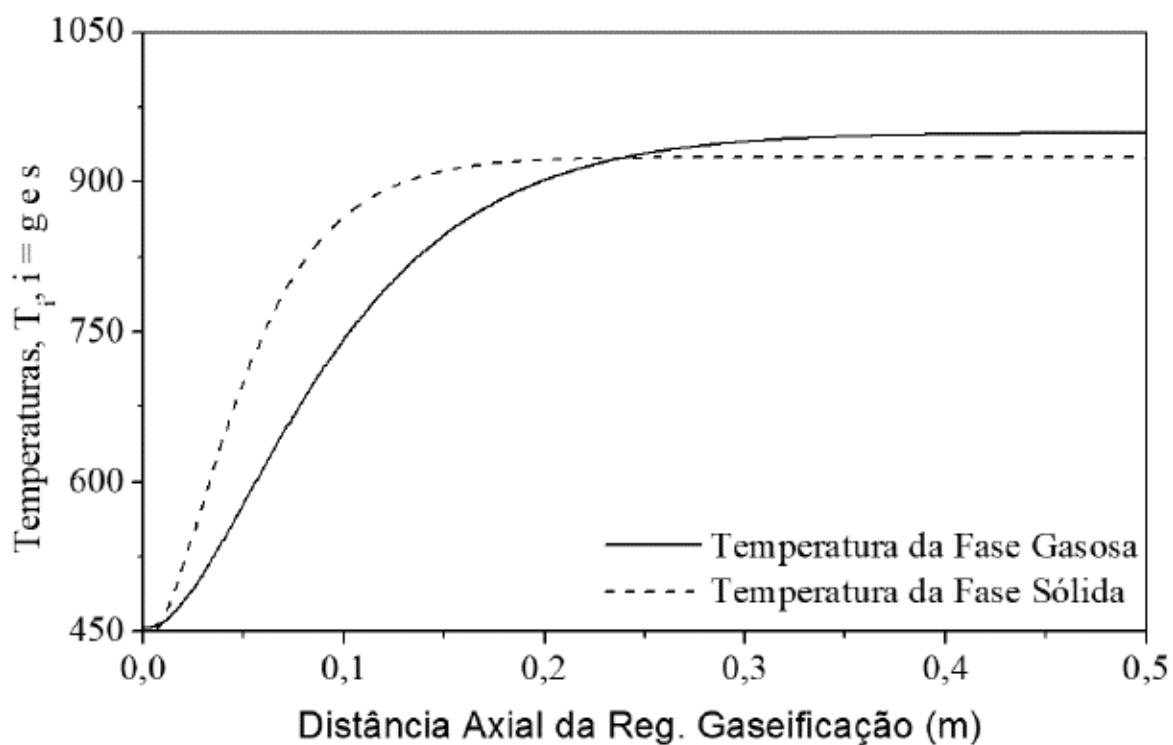


Figura 5.2: Perfis de temperaturas para as fases gasosa e sólida nas seguintes condições: $t = 7 \text{ seg}$, $Q_g = 9,875 \times 10^{-1} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, $T_g = 450^\circ\text{C}$ e $T_s = 470^\circ\text{C}$

A Figura (5.3) apresenta os perfis de temperaturas do gás preditos (T_g) nas temperaturas iniciais do gás ($T_{g,0}$) de 450°C, 550°C e 650°C, respectivamente. Nesta Figura, é observado que a maior $T_{g,0}$ de 650°C, resulta em menor distância ($\pm 0,28\text{m}$) para que a T_g alcance o valor máximo. Enquanto, é visto para a $T_{g,0}$ de 550°C, resulta em maior distância ($\pm 0,45\text{m}$) para a T_g atinja o valor máximo. Por outro lado, pode ser visto para a $T_{g,0}$ 450°C, o valor máximo para a T_g não é alcançado em 0,5m. Assim, pode ser concluído que as T_g preditas (com $T_{g,0}$ de 650°C e 550°C) igualam-se no momento em que a combustão termina devido o esgotamento do oxigênio em $\pm 0,45$. A T_g predita em relação à $T_{g,0}$ de 450°C mostra que a combustão ainda não terminou em 0,5 devido a presença de oxigênio.

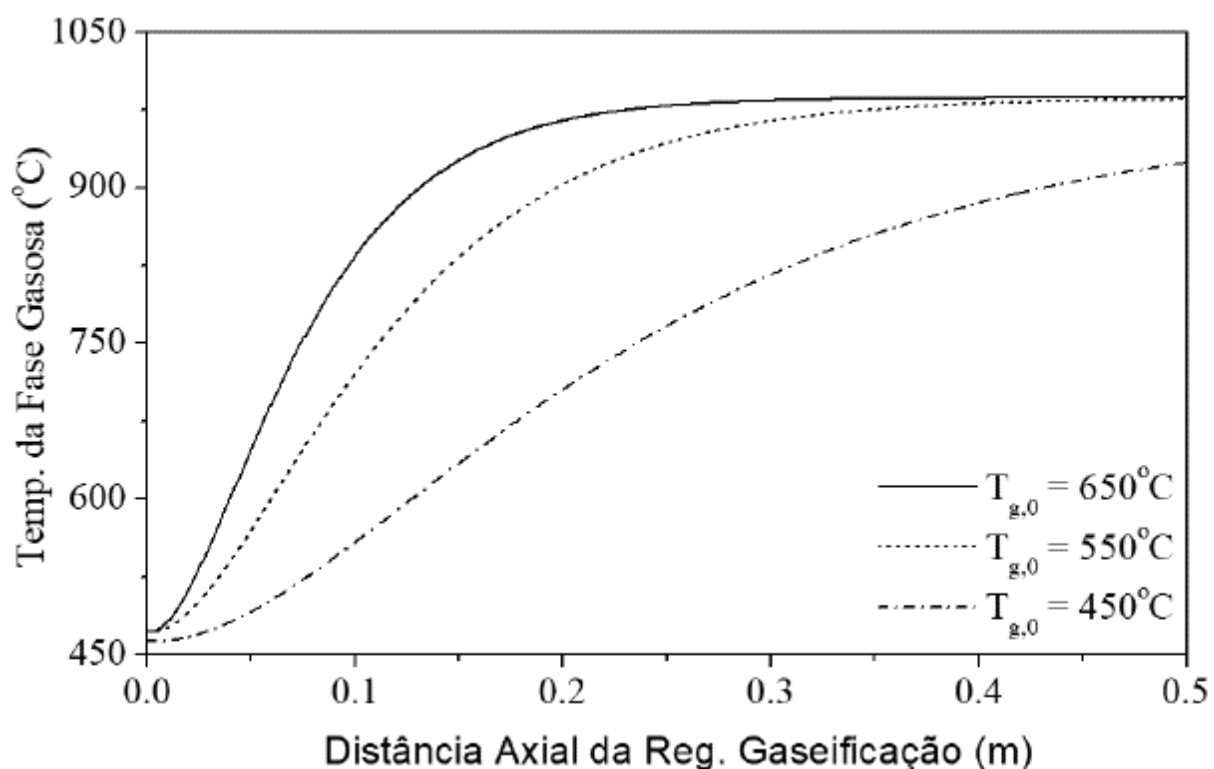


Figura 5.3: Perfis da temperatura na fase gasosa para diferentes $T_{g,0}$ nas seguintes condições: $t = 7\text{seg}$, $Q_g = 9,875 \times 10^{-1} \text{ m}^3$

A Figura (5.4) relata os perfis de temperaturas do sólido preditos (T_s) nas temperaturas iniciais do gás ($T_{g,0}$) de 450°C, 550°C e 650°C, respectivamente. Na presente Figura, é descrito que a maior $T_{g,0}$ de 650°C, resulta em menor distância ($\pm 0,15\text{m}$) de modo que a T_g atinge o valor máximo. Por outro lado, é visto para a $T_{g,0}$ de 550°C, resulta em maior distância ($\pm 0,25\text{m}$) para que a T_s atinja o valor máximo. Nas $T_{g,0}$ de 550°C e 450°C, o perfil de T_s em 450°C passa o perfil de T_s em 550°C em $\pm 0,40\text{m}$. O pequeno aumento de T_s entre $\pm 0,40\text{m}$ e 0,5m com decréscimo da $T_{g,0}$ é atribuído as reações de combustão homogênea e heterogênea.

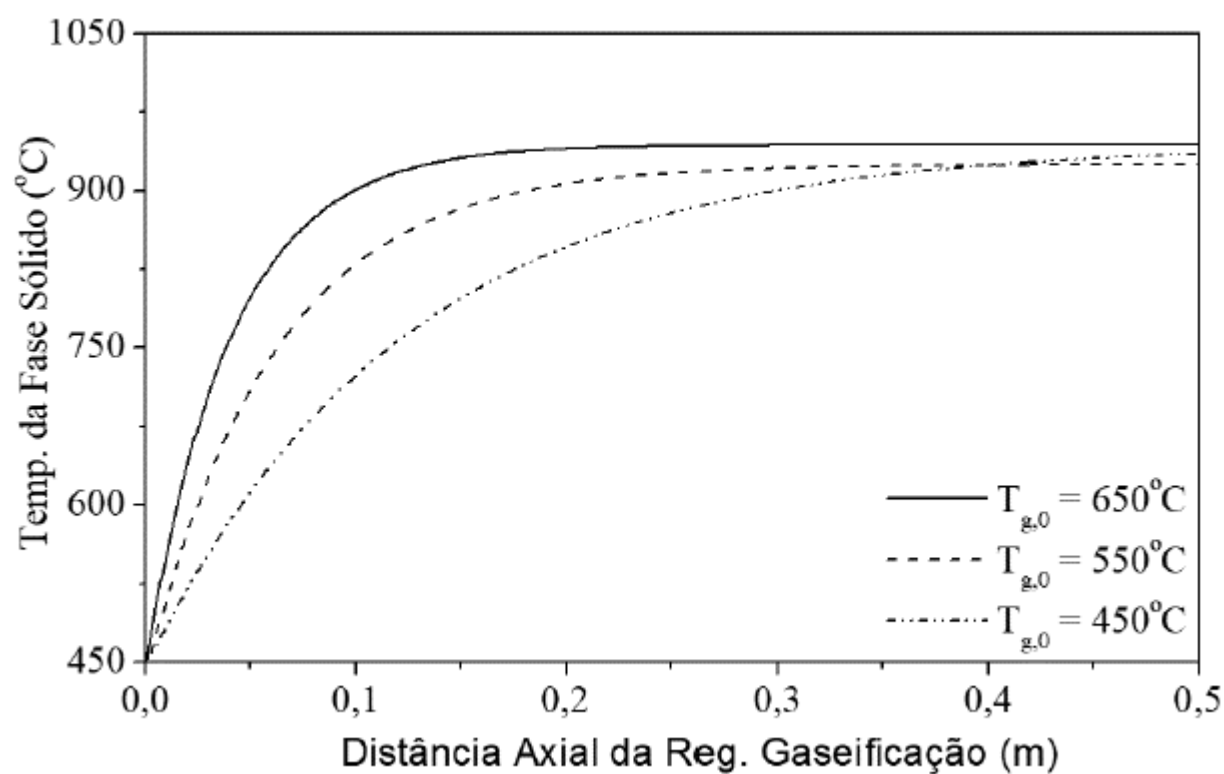


Figura 5.4: Perfis da temperatura da fase sólida para diferentes $T_{g,0}$ nas seguintes condições: $t = 7\text{seg}$,

$$Q_g = 9,875 \times 10^{-1} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$$

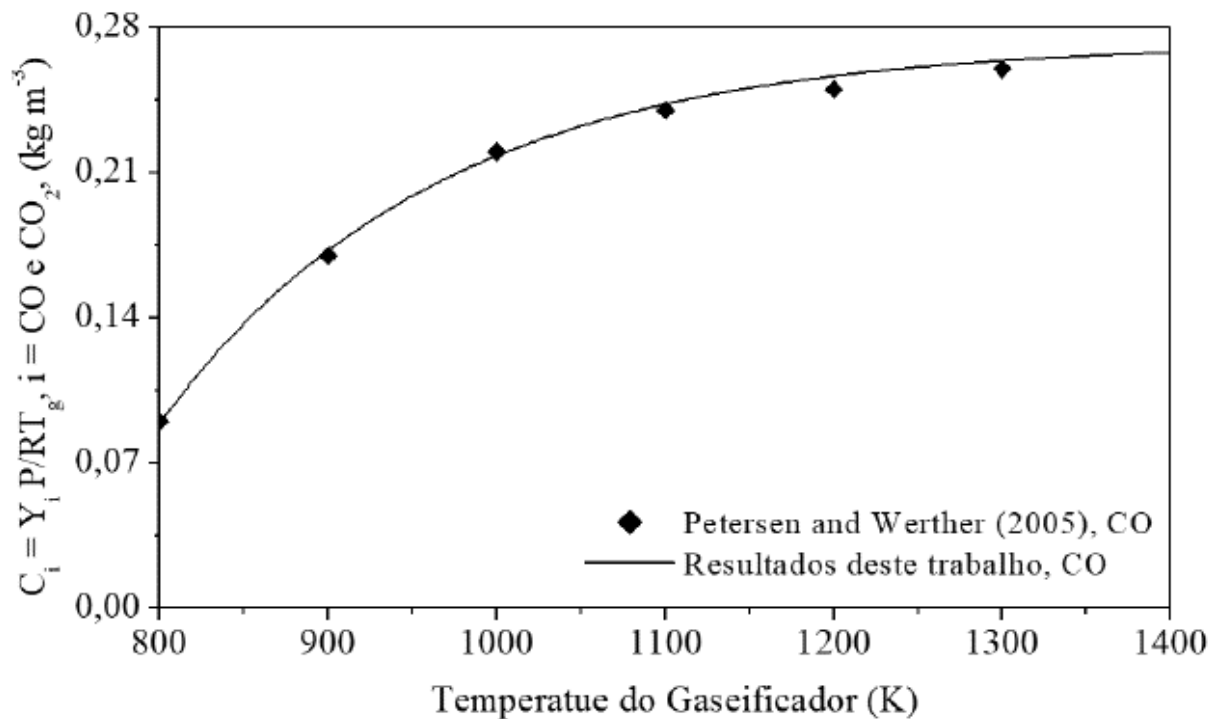


Figura 5.5: Comparações dos perfis de concentração preditos para CO e dados de Peterson e Werther (2005) versus a temperatura do gaseificador na região de gaseificação do leito fluidizado borbulhante: $t = 4\text{seg}$, $Q_g = 8,975 \times 10^{-1} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ e $T_g = 550^\circ\text{C}$

A Figura (5.5) tem confirmado através de comparação a validação do CCO ao longo da distância axial da região gaseificação do gaseificador de fluidizado borbulhante usando dados da literatura. A comparação entre os resultados desta pesquisa e resultados obtidos por Peterson e Werther (2005) mostrou um bom ajuste entre nossos resultados e os resultados apresentados por Peterson e Werther (2005).

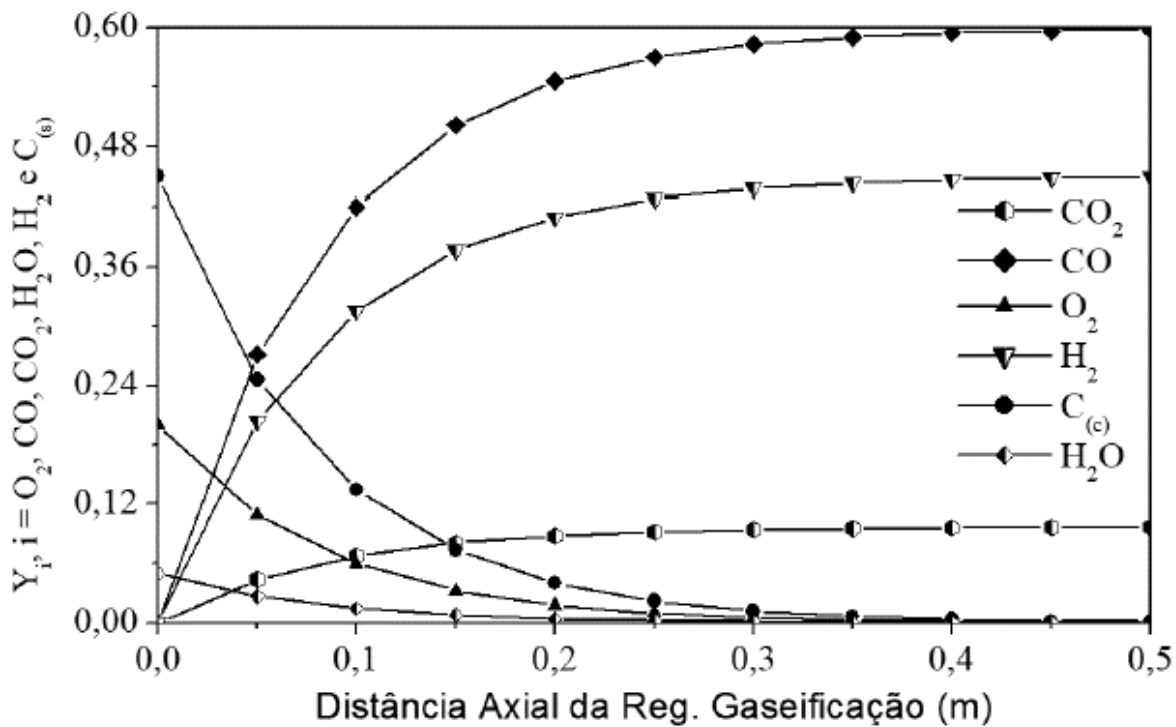


Figura 5.6: Perfis das frações molares para as espécies químicas O_2 , CO , CO_2 , H_2O , H_2 e $C(s)$ versus a distância axial da região gaseificação do gaseificador de fluidizado borbulhante: $t = 7$ seg, $Q_g =$

$$9,875 \times 10^{-1} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}, T_{g,0} = 450^\circ\text{C} \text{ e } T_{s,0} = 470^\circ\text{C}$$

A Figura (5.6) apresenta os perfis de frações molares das espécies químicas O_2 , CO , CO_2 , H_2O , H_2 e $C(s)$ ao longo da distância axial da região de gaseificação do gaseificador de fluidizado borbulhante nas $T_{g,0} = 450^\circ\text{C}$ e $T_{s,0} = 470^\circ\text{C}$. As espécies químicas CO , CO_2 e H_2 são produzidas a partir dos valores iniciais $Y_{CO} = 0,00$, $Y_{CO_2} = 0,00$ e $Y_{H_2} = 0,00$ até alcançar um valor máximo, enquanto as espécies químicas O_2 , H_2O e $C(s)$ foram consumidas desde os valores iniciais $Y_{O_2} = 0,28$, $Y_{H_2O} = 0,20$ e $Y_{C(s)} = 0,45$. Após $0,4\text{m}$, as espécies químicas O_2 , H_2O e $C(s)$ tem sido totalmente consumidas. Quanto à espécie química CO_2 , a qual atinge o valor máximo (otimizado) da fração molar em $\pm 0,08$. Por outro lado, as espécies químicas CO e H_2 alcançam os valores máximos (otimizados) em $\pm 0,42$ para H_2 e $\pm 0,58$ para CO .

Nas Figuras (5.7), (5.8) e (5.9) foram realizadas uma análise de sensibilidade para obter a produção das espécies químicas CO e H_2 em diferente vazão de gás na entrada (Q_g) com os parâmetros $t = 7$ seg, $Q_g = 9,875 \times 10^{-1} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, $T_{g,0} = 450^\circ\text{C}$ e $T_{s,0} = 470^\circ\text{C}$, $Y_{CO} = 0,00$ e $Y_{H_2} = 0,00$ fixados.

A Figura (5.7) relata a comparação entre Y_{CO} e Y_{H_2} para $Q_g = 8,575 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ e demais parâmetros fixos. Após $\pm 0,40\text{m}$, a Y_{CO} alcança um valor máximo de $0,50$ e a Y_{H_2} indica um valor máximo de $0,45$.

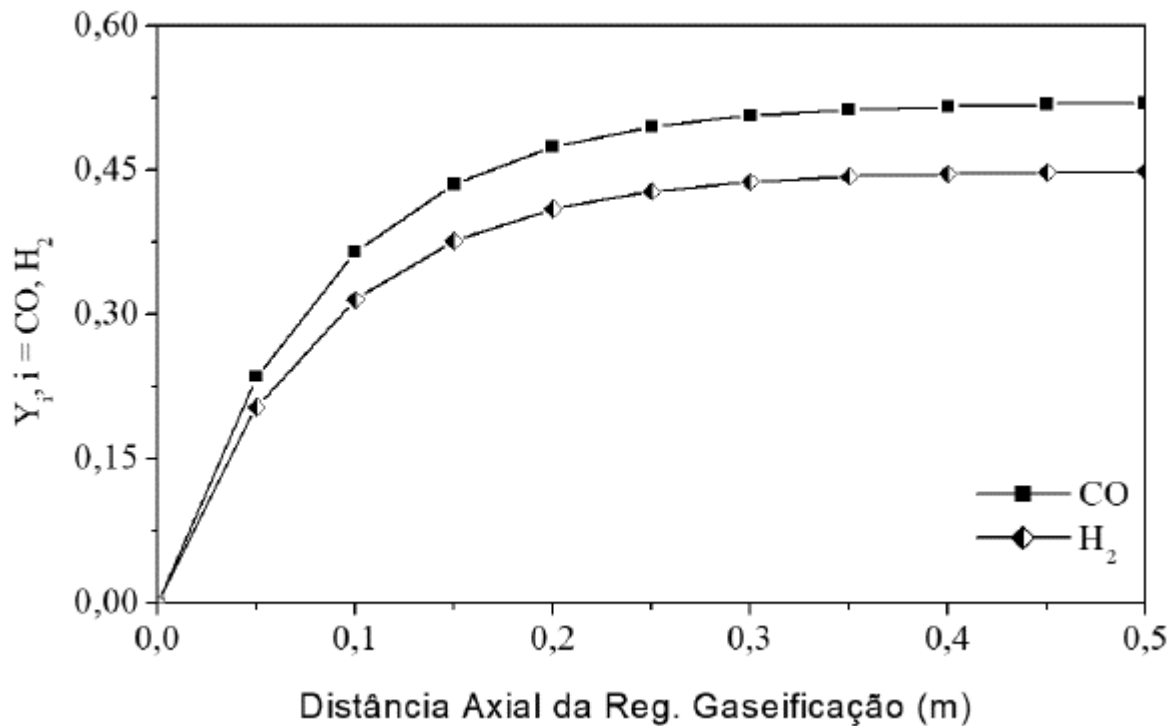


Figura 5.7: Perfis das frações molares para as espécies químicas CO e H_2 versus a distância axial da região de gaseificação do gaseificador de leito fluidizado borbulhante: $t = 7$ seg, $Q_g = 8,575 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, $T_{g,0} = 450^\circ\text{C}$ e $T_{s,0} = 470^\circ\text{C}$

A Figura (5.8) descreve a comparação entre Y_{CO} e Y_{H_2} para $Q_g = 7,675 \times 10^{-4} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ com os demais parâmetros fixos. Depois de 0,45m, a Y_{H_2} alcança um valor máximo de $\pm 0,42$ e a Y_{CO} atinge um valor máximo de $\pm 0,22$ entre 0,35m a 0,50m.

A Figura (5.9) apresenta a comparação entre Y_{CO} e Y_{H_2} para $Q_g = 6,396 \times 10^{-4} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ com outros parâmetros fixados. Em 0,50m, a Y_{H_2} chega a um valor máximo de $\pm 0,31$ e a Y_{CO} alcança um valor máximo de $\pm 0,02$ entre 0,20m a 0,50m.

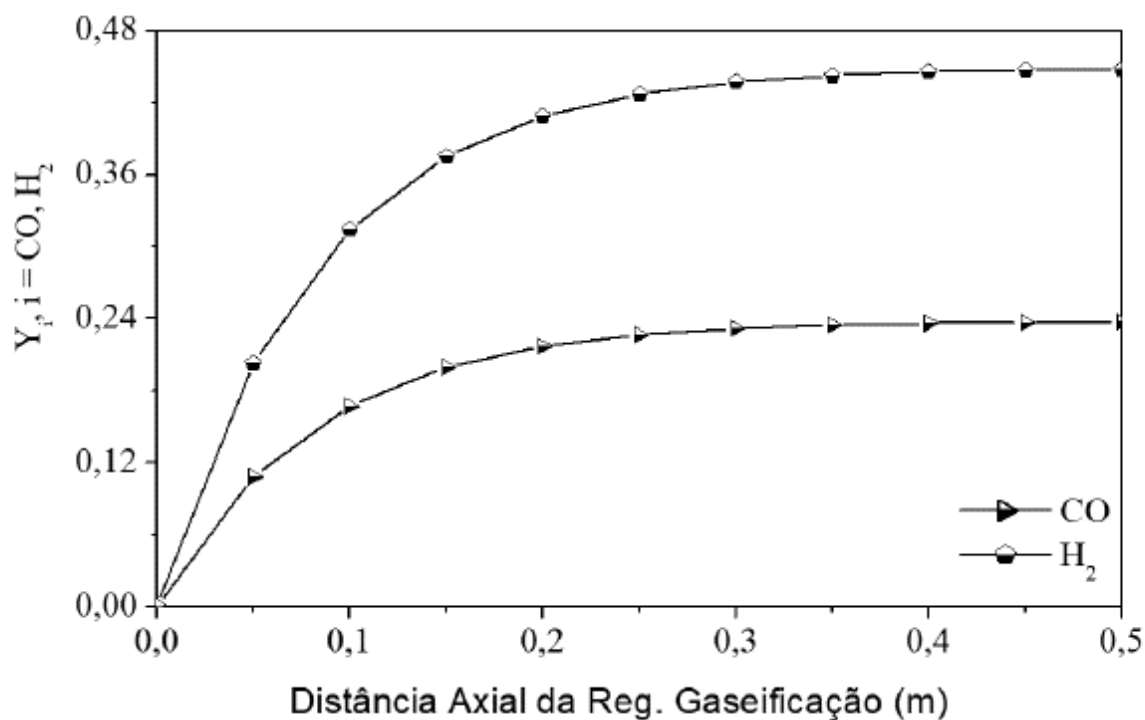


Figura 5.8: Perfis das frações molares para as espécies químicas CO e H₂ versus a distância axial da região gaseificação do gaseificador de fluidizado borbulhante: $t = 7$ seg, $Q_g = 7,675 \times 10^{-4} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, $T_{g,0} = 450^\circ\text{C}$ e $T_{s,0} = 470^\circ\text{C}$

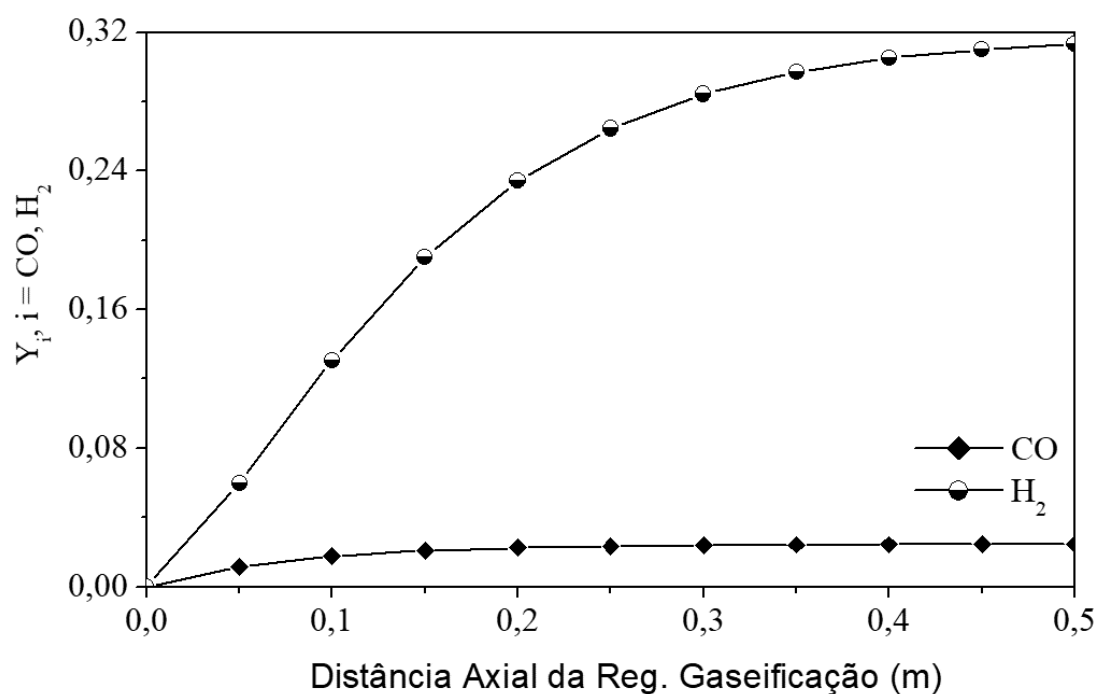


Figura 5.9: Perfis das frações molares para as espécies químicas CO e H₂ versus a distância axial da região gaseificação do gaseificador de fluidizado borbulhante: $t = 7$ seg, $Q_g = 6,395 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, $T_{g,0} = 450^\circ\text{C}$ e $T_{s,0} = 470^\circ\text{C}$

A Figura (5.10) mostra as taxas líquidas de cada espécie química ao longo da região de gaseificação do gaseificador de leito fluidizado borbulhante. As taxas líquidas r_{CO} , r_{H_2} e r_{CO_2} relataram um crescimento entre 0,00m a 0,50m devido ao aumento da endotermicidade (850°C) e da produção das espécies químicas Co, CO₂ e H₂. As taxas líquidas r_{H_2O} , $r_{C(s)}$ e r_{O_2} sofrem decrescimento por causa do consumo das espécies químicas H₂O, C(s) e O₂.

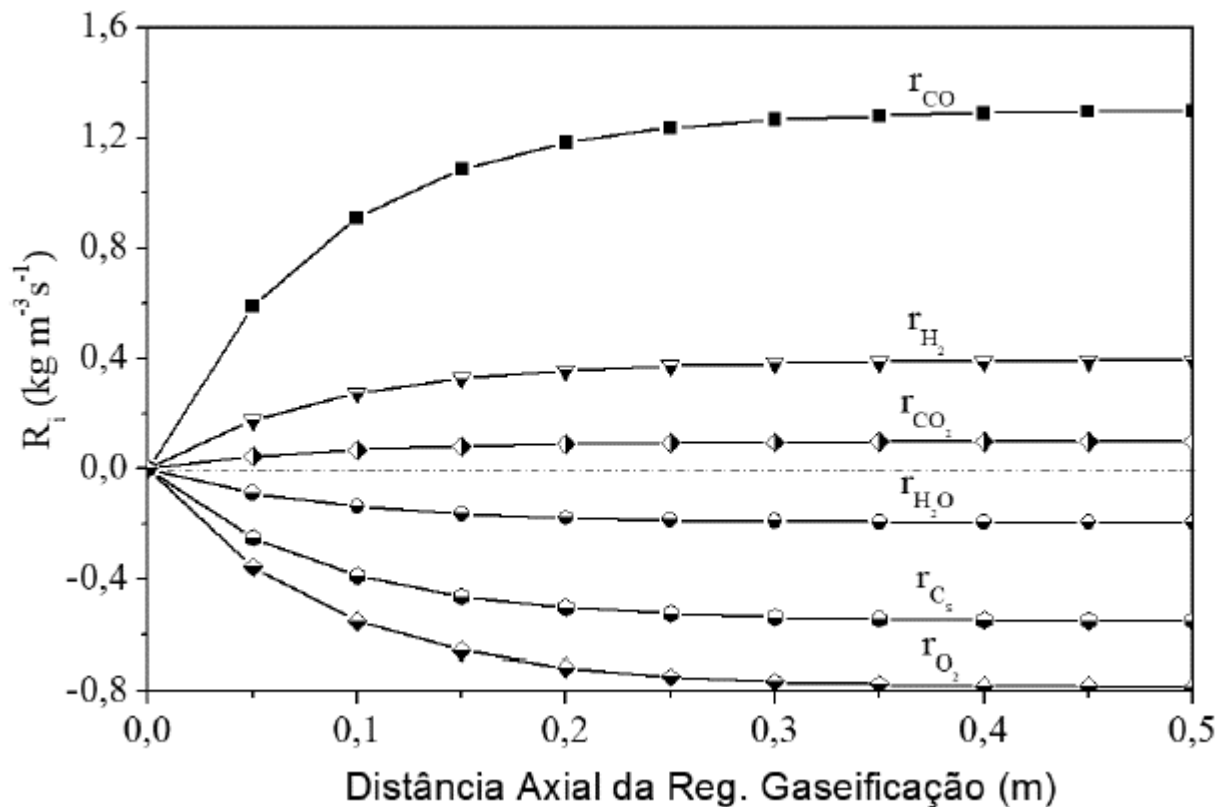


Figura 5.10: Perfis das taxas líquidas para as espécies químicas O₂, CO, CO₂, H₂O, H₂ e C(s) versus a distância axial da região gaseificação do gaseificador de fluidizado borbulhante: $t = 7$ seg, $Q_g = 9,875 \times 10^{-1} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, $T_{g,0} = 450^\circ\text{C}$ e $T_{s,0} = 470^\circ\text{C}$

CAPÍTULO 6

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Conduzida no contexto da linha de combustão e gaseificação, a presente pesquisa recorreu á metodologia numérica no sentido de realizar o desenvolvimento do processo não-isotérmico na região de gaseificação de um gaseificador de leito fluidizado borbulhante em operação dinâmica tendo em vista a produção de gás combustível (CO e H_2).

Na direção da obtenção de condições adequadas para se processar o modelo dinâmico não-isotérmico envolvendo os balanços de energia para as fases gasosa e sólida e as espécies químicas O_2 , CO , CO_2 , H_2O , H_2 e C(s) na região de gaseificação do gaseificador de leito fluidizado borbulhante, recorreu-se ao processo de discretização das equações diferenciais parciais (EDPs) para equações diferenciais ordinárias (EDOs). Nas condições admitidas para esta pesquisa, as EDOs foram resolvidas numericamente usando o método de Range-Kutta Gill para predizer as variáveis do processo (T_g , T_s , Y_{O_2} , Y_{CO} , Y_{CO_2} , $Y_{\text{H}_2\text{O}}$, Y_{H_2} e $Y_{\text{C(s)}}$) em análise.

A elaboração do código computacional para processar e analisar o comportamento das variáveis em estudo desta pesquisa permitiu a conduzir as seguintes conclusões:

1. O modelo desenvolvido para região de gaseificação do gaseificador de leito fluidizado borbulhante conduziu ao cálculo satisfatório do perfil da variável T_g confirmado pela validação comparativa entre os resultados desta pesquisa e os resultados obtidos por Ross et al., (2004). Além disso, também foi permitido o cálculo correto da variável CCO comprovado pela validação comparativa entre os resultados deste trabalho e os resultados obtidos por Petersen e Werther (2005);
2. A comparação entre T_g e T_s permitiu prever que após 0,25 da região de gaseificação do gaseificador de leito fluidizado borbulhante ocorre uma geração líquida de gás devido às reações de devolatização do sólido, homogêneas e heterogêneas;
3. Uma análise de sensibilidade tem sido realizada com $T_{g,0}$ sobre os perfis das variáveis T_g e T_s , mostrando uma forte influência de $T_{g,0}$ sobre os perfis das T_g e T_s . Em prol desta influência, a $T_{g,0}$ deve considerada no controle de processo deste equipamento;
4. Uma análise de sensibilidade foi relatada com a vazão de gás de alimentação (Q_g) sobre as variáveis Y_{CO} e Y_{H_2} , resultando em um grande impacto de Q_g sobre os perfis das variáveis Y_{CO} e

Y_{H_2} . Em relação a este impacto, a Q_g deve ser considerada no controle de produção das espécies químicas CO e H_2 ;

5. As taxas líquidas (r_{CO} , r_{H_2} , r_{CO_2} , r_{H_2O} , $r_{C(s)}$ e r_{O_2}) de cada espécie química foram calculadas. Sendo que, as r_{CO} , r_{H_2} e r_{CO_2} mostraram crescimento e r_{H_2O} , $r_{C(s)}$ e r_{O_2} relataram um decrescimento ao longo da região de gaseificação do gaseificador de leito fluidizado borbulhante.

Uma perspectiva futura para continuação deste trabalho seria uma análise detalhada do gaseificador de leito fluidizado borbulhante considerando os balanços de momentos para as fases gasosa e sólida bem como as reações homogêneas do processo. Além disso, desenvolver um modelo para a região de freeboard envolvendo os balanços de momento para fase gasosa, balanço de energia para a fase gasosa e os balanços das espécies químicas presentes nesta região.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Abdullah, M. Z.; Husam, Z.; Yin Pong, S. L., "Analysis of coal flow fluidization test results for various biomass fuels, *Biomass & Bioenergy*, v. 24, pp. 487-494, (2003).
- Basu, P., "Combustion of coal circulating fluidized-bed boilers: a review." *Chem. Eng. Sci.*, v. 54, pp. 5545-5557, (1999).
- Broadhurst, T. E.; Becker, H. A.; "Onset of fluidization and slugging in beds of uniform particles, *Aiche.*, v.21, pp. 238-247, (1975).
- Consonni, S.; Larson, E. D., "Biomass-gasifier/aeroderivative gas turbine combined cycles: Part A – Technologies and Performance Modeling", *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, v.118, pp. 507-515, (1996).
- Consonni, S.; Larson, E. D., "Biomass-Gasifier / Aeroderivative gas turbine combined cycles: Part B – Performance calculations and economic assessment", *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, v.118, (Jul.), pp. 516-525, (1996).
- Craig, K. R.; Bain, R. L.; Overend, R. P., "Biomass power systems –Where We Are, where we are going and how to get there? The role of gasification", In: *EPRI Conference on New Power Generation Technology*, San Francisco, California, Oct, (1995).
- Craig, K. R.; Mann, M. K., "Cost and performance analysis of three integrated biomass gasification combined cycle power systems", In: *Proceedings of the Engineering Foundation Conference*, Snowbird, Utah, May, (1996).
- Fan, R.; Marchisio, D. L.; Fox, R. O. "CFD Simulation of polydisperse fluidized-bed polymerization reactors", *Sweeney hall, USA*, (2003)
- Farris, M.; Paisley, M. A.; Irving, J.; Overend, R. P., "The Biomass Gasification Process by Battelle/Ferco: Design, Engineering, Construction, and Startup", In: *Gasification Technologies Conference*, San Francisco, California, Oct, (1998).
- Gabra, M.; Pettersson, E.; Backman, R.; Kjellstrom, B., "Evaluation of cyclone gasifier performance for gasification of sugar cane residue-Part I: gasification of cane trash", *Biomass & Bioenergy*, v. 21, pp. 371-380, (2001b)
- Graham, R. L.; Walsh, M. E., "Evaluating the economic costs, benefits and tradeoffs of dedicated biomass energy systems: the importance of scale", In: *Second Biomass Conference of the Americas: Energy, Environment, Agriculture, and Industry*, p.p. 207-215, Portland, Oregon, Aug, (1996).
- Gustavsson, L., "Energy efficiency and competitiveness of biomass-based energy systems", *Energy*, v. 22, n. 10, pp. 959-967, (1997).
- García, L.; Salvador, M.L.; Arauzo, J.; Bilbao, R., "Catalytic CO₂ gasification of biomass in a fluidized bed reactor, Influence of catalyst weight/biomass flow rate and CO₂/biomass ratio, *Fluidization (II)*", Toulouse, France, pp. 657-664, (2000).

Heitor, M.V.; Whitelaw, J.H., “Velocity temperature and species characteristics of the on in a gas turbine combustor”, *Combust. Flame*, v. 1, pp. 64-76, (1986).

S.R.A.; Prins, W.; van der Drift, B.; Van Swaaij, W.P.M., “Principles of a novel multistage circulating fluidized bed reactor for biomass gasification”, *Chem. Eng. Sci.* v.58, pp.725–731, (2003).

Kerinin, E.V.; Shifrin, E.I., “Mathematical Model of Coal Combustion and Gasification in a Passage of an Underground Gas Generator, Combustion, explosion and Shock Waves”, *Academy of Sciences, Russia*, pp. 148–154, (1993).

Krause, G. G., *Avaliação da Tecnologia de Sistemas Integrados Gaseificação -Ciclo Combinado para Geração Termelétrica no Brasil*. Tese de M. Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, (1990).

Kruse, M.; Schoenfelder, H.; Werther, J., “A two-dimensional model for gas mixing in the upper dilute zone of a circulating fluidized bed”, *Can. J. Chem. Eng.*, v. 73. pp. 620-634, (1995).

Kunii, D.; Levenspiel, O., “Fluidization Engineering”, second ed., Butterworth- Heinemann, Boston, (1991).

Larson, E. D., “Technology for electricity and fuels from biomass”, *Revisit Energy Environmet*, v. 18, pp. 567-630, (1993).

Larson, E. D., “Cogeração de eletricidade na indústria sucroalcooleira”, In: *Perspectivas do Álcool Combustível no Brasil*, pp.77-87, São Paulo, (1995).

Larson, E. D., Williams, R. H., “Biomass-Gasifier Steam-Injected Gas Turbine Cogeneration”, *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, v.112, (pp. 157-163 (1990)

Levenspiel, O., “Modeling in chemical engineering”, *Chem. Eng. Sci.*, v. 57, pp. 4691-4696, (2002).

Li, X.; Grace, J.R.; Watkinson, A.P.; Lim, C.J.; Erguedenler, A., “Equilibrium modeling of gasification: a free energy minimization approach and its application to a circulating fluidized bed coal gasifier”, *Fuel*, v. 80, pp. 195–207, (2001).

Lora, E. S.; Happ, J. F.; Cortez, L. A. B., 1997, “Caracterização e Disponibilidade da Biomassa”. In: *Universidade do Amazonas, AM, Tecnologias de Conversão Energética da Biomassa*, 1ed., capítulo I, Manaus, Amazonas, Brasil, (1997).

Ma, H.K.; Lee, F.H.; Wang, M.W., “Numerical study on heat and mass transfer in a liquid-fueled gas turbine combustor”, *Int. J. Heat Mass Transfer*, v. 36 pp. 3271-3281, (1993).

Macchi, E., “Power Generation Including Cogeneration”, *Energetic Department–Politecnico di Milano*, Milão, Itália, (1991).

Magnussen, B.F., Hjertager, B.H., “On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion”, in: *Sixteenth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, v.34, pp. 719-727, (1977)

Narva'ez, I.; Or'yo, A.; Aznar, M.P.; Corella, J., "Biomass gasification with air in an atmospheric bubbling fluidized bed effect of six operational variables on the quality of the produced raw gas", *Ind. Eng. Chem. Res.* 35 (1996) 2110–2120.

Moutinho Junior, D. A.; Silva, J. D., *Dynamic Analysis of The Thermal and Mass Effects of a fluidized Bed Gasifier Gasification Region*, 21st Brazilian Congress of Mechanical Engineering, October 24-28, Natal, RN, Brazil, p.1-8, 2011.

Nordin, A.; Eriksson L.; Oehman, M., "NO reduction in a fluidized bed combustor with primary measures and selective non-catalytic reduction-a screening study using statistical experimental designs", *Fuel*, v. 74, pp. 128-135, (1995)

Odgers, J.; Kretschmer, D., Pearce, G.F., "The combustion of droplets within gas turbine combustors: some recent observations on combustion efficiency", *ASME J. Gas Turbine Power*, v.115, pp. 522-536, (1993).

Oliveira, C. C. e Silva, J. D., *Dynamic Modelling of the Gasification Region of a Bubbling Fluidized Bed Gasifier*, *Chemical Engineering Transactions*, v. 29, pp. 1-6, (2012).

Petersen, J., Werther, J., *Experimental investigation and modeling of gasification of sewage sludge in the circulating fluidized bed*, *Chemical Engineering and Processing*, 44, 717-736, (2005).

Ross D.P., Yan H., Zhang, D., *Modelling of a laboratory-scale bubbling fluidized bed gasifier with feeds of both char and propane*, *Fuel*, v. 83, pp. 1979-1990, (2004).

Scala, F.; Salatino, P., "Modelling fluidized bed combustion of high-volatile solid fuels", *Chem. Eng. Sci.*, v. 57, pp. 1175 – 1196, (2000).

Sit, S. P. and Grace, R., "Effect of bubble interaction on interphase mass transfer in gas fluidized beds", *Chem. Eng. Sci.*, v. 36, pp. 327-335, (1981).

Silva, J. D., *Numerical Modelling of the Fluidynamics in a Bubbling Fluidized Bed Biomass Gasifier*. *Journal of Petroleum and Gas Engineering*, 3, 35-40. (2012) Sokolov, K.Y.; Tumanovskiy, A.G.; Gutnik, M.N.; Sudarev, A.V.; Zakharov, Y.I., Winogradov, E.D., "Mathematical modeling of an annular gas turbine", *ASME J. Eng. Gas Turbine Power*, v.117, pp. 94-112, (1995).

Srinivasan, R.A.; Siramulu, S.; Kulasekaran, S.; Agarwal, P.K., *Mathematical modeling of fluidized bed combustion-2 combustion of gases*, *Fuel*, v.77, pp.1033-1049, (1998).

Syamlal, M.; Rogers, W.; O'brien, T. J., *MFIX Documentation: Theory Guide*, U. S. Department of Energy, Morgantown, West Virginia, (1993).

Xiu, G.; Li, P.; Rodrigues, A. E. *New Generalized for improving sorption-enhanced reaction process*, *Chemical Engineering Science*, v.58, pp. 3425-3437, (2002)

APÊNDICE (A): SISTEMA DE EDOS DISCRETIZADO

$$\frac{dT_g}{dt} = \alpha_{g,11}(T_g)_j^k - \alpha_{g,4}(T_s)_j^k + \alpha_{g,5}(T_w)_j^k + \alpha_{g,12} \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{d(T_s)}{dt} = \beta_{s,13}(T_s)_j^k + \beta_{s,4}(T_g)_j^k + \beta_{s,5}(T_w)_j^k + \beta_{s,6}(C_{O_2})_j^k + \beta_{s,7} \frac{(C_{H_2O})_j^k}{(P_i)_j^k} + \beta_{s,14} \quad (\text{A.2})$$

$$\frac{dY_{O_2}}{dt} = \gamma_{O_2,11}(Y_{O_2})_j^k - \gamma_{O_2,4}(Y_C)_j^k - \gamma_{O_2,5}(C_{O_2})_j^k + \gamma_{O_2,12} \quad (\text{A.3})$$

$$\frac{dY_{CO}}{dt} = \nu_{CO,12}(Y_{CO})_j^k - \nu_{CO,4}(Y_C)_j^k + \nu_{CO,5}(C_{O_2})_j^k + \nu_{CO,6} \frac{(C_{H_2O})_j^k}{(P_i)_j^k} + \nu_{CO,13} \quad (\text{A.4})$$

$$\frac{dY_{CO_2}}{dt} = \vartheta_{CO_2,12}(Y_{CO_2})_j^k - \vartheta_{CO_2,4}(Y_C)_j^k + \vartheta_{CO_2,5}(C_{O_2})_j^k + \vartheta_{CO_2,6} \frac{(C_{H_2O})_j^k}{(P_i)_j^k} + \vartheta_{CO_2,13} \quad (\text{A.5})$$

$$\frac{dY_{H_2O}}{dt} = \phi_{H_2O,11}(Y_{H_2O})_j^k - \phi_{H_2O,4}(Y_C)_j^k - \phi_{H_2O,5} \frac{(C_{H_2O})_j^k}{(P_i)_j^k} + \phi_{H_2O,12} \quad (\text{A.6})$$

$$\frac{dY_{H_2}}{dt} = \psi_{H_2,11}(Y_{H_2})_j^k - \psi_{H_2,4}(Y_C)_j^k + \psi_{H_2,5} \frac{(C_{H_2O})_j^k}{(P_i)_j^k} + \psi_{H_2,12} \quad (\text{A.7})$$

$$\frac{dY_{C(s)}}{dt} = \sigma_{C(s),11}(Y_{C(s)})_j^k - \sigma_{C(s),4}(\bar{Y}_i)_j^k + \sigma_{C(s),5}(C_{O_2})_j^k - 4,45 \exp \left[\frac{-E_a}{R(T_s)_j^k} \right] - \sigma_{C(s),12} \quad (\text{A.8})$$

onde,

$$(P_i)_j^k = 1 + K_{2,H_2O}(C_{H_2O})_j^k + K_{2,H_2}(C_{H_2})_j^k + K_{2,CO}(C_{CO})_j^k$$

APÊNDICE (B): COEFICIENTES REFERENTES À EQUAÇÃO (A-1)

$$\alpha_{g,1} = \frac{2Q_g}{\pi d_c^2 \Delta z} + \frac{K_g}{C_{\rho,g} \rho_g (\Delta z)^2}; \alpha_{g,2} = \frac{2Q_g}{\pi d_c^2 \Delta z} - \frac{K_g}{C_{\rho,g} \rho_g (\Delta z)^2}; \alpha_{g,3} = \frac{K_g}{C_{\rho,g} \rho_g (\Delta z)^2} \quad (B.1)$$

$$\alpha_{g,4} = \frac{h_{gs} a_{gs}}{\varepsilon_g C_{\rho,g} \rho_g}; \alpha_{g,5} = \frac{4h_{gw} a_{gs}}{\varepsilon_g C_{\rho,g} \rho_g d_c}; \alpha_{g,6} = \frac{C_{\rho,g} \rho_g Q_g \Delta z}{K_g \pi d_c^2}; \alpha_{g,7} = \frac{2 - \alpha_{g,6}}{2 + \alpha_{g,6}} \quad (B.2)$$

$$\alpha_{g,8} = \frac{2\alpha_{g,6} T_{g,0}}{2 + \alpha_{g,6}}; \alpha_{g,9} = \frac{2 + \alpha_{g,6}}{2 - \alpha_{g,6}}; \alpha_{g,10} = \frac{2\alpha_{g,6} T_{g,0}}{2 - \alpha_{g,6}} \quad (B.3)$$

$$\alpha_{g,11} = \alpha_{g,1} \alpha_{g,7} - \alpha_{g,2} \alpha_{g,9} - \alpha_{g,3} + \alpha_{g,4} - \alpha_{g,5}; \alpha_{g,12} = \alpha_{g,1} \alpha_{g,8} + \alpha_{g,2} \alpha_{g,10} \quad (B.4)$$

APÊNDICE (C): COEFICIENTES. REFERENTES À EQUAÇÃO (A-2)

$$\beta_{s,1} = \frac{K_s}{\rho_s C_{p,s} (\Delta z)^2} - \frac{2 N_s}{\pi d_c^2 (\Delta z)^2}; \beta_{s,2} = \frac{K_s}{\rho_s C_{p,s} (\Delta z)^2} + \frac{2 N_s}{\pi d_c^2 (\Delta z)^2} \quad (C.1)$$

$$\beta_{s,3} = \frac{2 K_s}{\rho_s C_{p,s} (\Delta z)^2} + \frac{h_{sg} a_{sg}}{\varepsilon_s \rho_s C_{p,s}} - \frac{4 h_w}{\varepsilon_s \rho_s C_{p,s} d_c}; \beta_{s,4} = \frac{h_{sg} a_{sg}}{\varepsilon_s \rho_s C_{p,s}}; \beta_{s,5} = \frac{4 h_w}{\varepsilon_s \rho_s C_{p,s} d_c} \quad (C.2)$$

$$\beta_{s,6} = \frac{\Delta H_{r,I} k_{r,I} f(1)}{\varepsilon_s \rho_s C_{p,s}}; \beta_{s,7} = \frac{\Delta H_{r,II} k_{r,II} f(2)}{\varepsilon_s \rho_s C_{p,s}}; \beta_{s,8} = \frac{4 \varepsilon_s N_s C_{p,s}}{\pi d_c^2 K_{s,eff}}; \beta_{s,9} = \frac{2 + \beta_{s,8} \Delta z}{2 - \beta_{s,8} \Delta z} \quad (C.3)$$

$$\beta_{s,10} = \frac{2 \beta_{s,8} \Delta z T_{s,0}}{2 - \beta_{s,8} \Delta z}; \beta_{s,11} = \frac{2 - \beta_{s,8} \Delta z}{2 + \beta_{s,8} \Delta z}; \beta_{s,12} = \frac{2 \beta_{s,8} \Delta z T_{s,0}}{2 + \beta_{s,8} \Delta z} \quad (C.4)$$

$$\beta_{s,13} = \beta_{s,1} \beta_{s,9} + \beta_{s,2} \beta_{s,11} - \beta_{s,3}; \beta_{s,14} = \beta_{s,2} \beta_{s,12} - \beta_{s,1} \beta_{s,10} \quad (C.5)$$

APÊNDICE (D): COEFICIENTES REFERENTES À EQUAÇÃO (A-3)

$$\gamma_{O_2,1} = \frac{D_{O_2}}{(\Delta z)^2} - \frac{2Q_g}{\pi d_c^2 \Delta z}; \gamma_{O_2,2} = \frac{D_{O_2}}{(\Delta z)^2} + \frac{2Q_g}{\pi d_c^2 \Delta z}; \gamma_{O_2,3} = -\frac{2D_{O_2}}{(\Delta z)^2} + \frac{k_{gs} a_{gs}}{\varepsilon_g} \quad (D.1)$$

$$\gamma_{O_2,4} = \frac{k_{gs} a_{gs}}{\varepsilon_g}; \gamma_{O_2,5} = \frac{k_{r,I} f(1)}{\varepsilon_g}; \gamma_{O_2,6} = \frac{4Q_g}{D_{O_2} \pi d_c^2}; \gamma_{O_2,7} = \frac{2 + \gamma_{O_2,6} \Delta z}{2 - \gamma_{O_2,6} \Delta z} \quad (D.2)$$

$$\gamma_{O_2,8} = \frac{2 \gamma_{O_2,6} \Delta z Y_{O_2,0}}{2 - \gamma_{O_2,6} \Delta z}; \gamma_{O_2,9} = \frac{2 - \gamma_{O_2,6} \Delta z}{2 + \gamma_{O_2,6} \Delta z}; \gamma_{O_2,10} = \frac{2 \gamma_{O_2,6} \Delta z Y_{O_2,0}}{2 + \gamma_{O_2,6} \Delta z} \quad (D.3)$$

$$\gamma_{O_2,11} = \gamma_{O_2,1} \gamma_{O_2,7} + \gamma_{O_2,2} \gamma_{O_2,9} + \gamma_{O_2,3}; \gamma_{O_2,12} = \gamma_{O_2,2} \gamma_{O_2,10} - \gamma_{O_2,1} \gamma_{O_2,8} \quad (D.4)$$

APÊNDICE (E): COEFICIENTES REFERENTES À EQUAÇÃO (A-4)

$$v_{CO,1} = \frac{D_{CO}}{2} - \frac{2Q_g}{\pi d_c^2 \Delta z}; v_{CO,2} = \frac{D_{CO}}{2} + \frac{2Q_g}{\pi d_c^2 \Delta z}; v_{CO,3} = -\frac{2D_{CO}}{(\Delta z)^2} + \frac{k_{gs} S_{gs}}{\varepsilon_g} \quad (E.1)$$

$$v_{CO,4} = \frac{k_{gs} S_{gs}}{\varepsilon_g}; v_{CO,5} = \frac{2(\alpha-1)k_{r,1}f(1)}{\varepsilon_g}; v_{CO,6} = \frac{(2-\beta)k_{r,2}f(2)}{\varepsilon_g}; v_{CO,7} = \frac{4Q_g}{D_{CO} \pi d_c^2} \quad (E.2)$$

$$v_{CO,8} = \frac{2+v_{CO,7} \Delta z}{2-v_{CO,7} \Delta z}; v_{CO,9} = \frac{2v_{CO,7} \Delta z Y_{CO,0}}{2-v_{CO,7} \Delta z}; v_{CO,10} = \frac{2-v_{CO,7} \Delta z}{2+v_{CO,7} \Delta z}; v_{CO,11} = \frac{2v_{CO,7} \Delta z Y_{CO,0}}{2+v_{CO,7} \Delta z} \quad (E.3)$$

$$v_{CO,12} = v_{CO,1} v_{CO,8} + v_{CO,2} v_{CO,10} + v_{CO,3}; v_{CO,13} = v_{CO,2} v_{CO,11} - v_{CO,1} v_{CO,9} \quad (E.4)$$

APÊNDICE (F): COEFICIENTES REFERENTES À EQUAÇÃO (A-5)

$$\vartheta_{CO_2,1} = \frac{D_{CO_2}}{(\Delta z)^2} - \frac{2Q_g}{\pi d_c^2 \Delta z}; \vartheta_{CO_2,2} = \frac{D_{CO_2}}{(\Delta z)^2} + \frac{2Q_g}{\pi d_c^2 \Delta z}; \vartheta_{CO_2,3} = -\frac{2D_{CO_2}}{(\Delta z)^2} + \frac{k_{gs} S_{gs}}{\varepsilon_g} \quad (F.1)$$

$$\vartheta_{CO_2,4} = \frac{k_{gs} S_{gs}}{\varepsilon_g}; \vartheta_{CO_2,5} = \frac{(2-\alpha)k_{r,1} f_{(1)}}{\varepsilon_g}; \vartheta_{CO_2,6} = \frac{(\beta-1)k_{r,2} f_{(2)}}{\varepsilon_g}; \vartheta_{CO_2,7} = \frac{4Q_g}{\pi d_c^2 D_{CO_2}} \quad (F.2)$$

$$\vartheta_{CO_2,8} = \frac{2 + \vartheta_{CO_2,7} \Delta z}{2 - \vartheta_{CO_2,7} \Delta z}; \vartheta_{CO_2,9} = \frac{2 \vartheta_{CO_2,7} \Delta z Y_{CO_2,0}}{2 - \vartheta_{CO_2,7} \Delta z}; \vartheta_{CO_2,10} = \frac{2 - \vartheta_{CO_2,7} \Delta z}{2 + \vartheta_{CO_2,7} \Delta z} \quad (F.3)$$

$$\vartheta_{CO_2,11} = \frac{2 \vartheta_{CO_2,7} \Delta z Y_{CO_2,0}}{2 + \vartheta_{CO_2,7} \Delta z}; \vartheta_{CO_2,12} = \vartheta_{CO_2,1} \vartheta_{CO_2,8} + \vartheta_{CO_2,2} \vartheta_{CO_2,9} + \vartheta_{CO_2,3} \quad (F.4)$$

$$\vartheta_{CO_2,13} = \vartheta_{CO_2,2} \vartheta_{CO_2,11} - \vartheta_{CO_2,1} \vartheta_{CO_2,11} \quad (F.5)$$

APÊNDICE (G): COEFICIENTES REFERENTES À EQUAÇÃO (A-6)

$$\phi_{H_2O,1} = \frac{D_{H_2O}}{(\Delta z)^2} - \frac{2Q_g}{\pi d_c^2 \Delta z}; \phi_{H_2O,2} = \frac{D_{H_2O}}{(\Delta z)^2} + \frac{2Q_g}{\pi d_c^2 \Delta z}; \phi_{H_2O,3} = \frac{k_{gs} S_{gs}}{\varepsilon_g} - \frac{2D_{H_2O}}{(\Delta z)^2} \quad (G.1)$$

$$\phi_{H_2O,4} = \frac{k_{gs} S_{gs}}{\varepsilon_g}; \phi_{H_2O,5} = \frac{\beta k_{r,2} f(2)}{\varepsilon_g}; \phi_{H_2O,6} = \frac{4Q_g}{\pi d_c^2 D_{H_2O}}; \phi_{H_2O,7} = \frac{2 + \phi_{H_2O,6} \Delta z}{2 - \phi_{H_2O,6} \Delta z} \quad (G.2)$$

$$\phi_{H_2O,8} = \frac{2\phi_{H_2O,6} \Delta z Y_{H_2O,0}}{2 - \phi_{H_2O,6} \Delta z}; \phi_{H_2O,9} = \frac{2 - \phi_{H_2O,6} \Delta z}{2 + \phi_{H_2O,6} \Delta z}; \phi_{H_2O,10} = \frac{2\phi_{H_2O,6} \Delta z Y_{H_2O,0}}{2 + \phi_{H_2O,6} \Delta z} \quad (G.3)$$

$$\phi_{H_2O,11} = \phi_{H_2O,1} \phi_{H_2O,7} + \phi_{H_2O,2} \phi_{H_2O,9} + \phi_{H_2O,3}; \phi_{H_2O,12} = \phi_{H_2O,2} \phi_{H_2O,10} - \phi_{H_2O,1} \phi_{H_2O,8} \quad (G.4)$$

APÊNDICE (H): COEFICIENTES REFERENTES À EQUAÇÃO (A-7)

$$\psi_{H_2,1} = \frac{D_{H_2}}{(\Delta z)^2} - \frac{2Q_g}{\pi d_c^2 \Delta z}; \psi_{H_2,2} = \frac{D_{H_2}}{(\Delta z)^2} + \frac{2Q_g}{\pi d_c^2 \Delta z}; \psi_{H_2,3} = \frac{k_{gs} S_{gs}}{\varepsilon_g} - \frac{2D_{H_2}}{(\Delta z)^2} \quad (H.1)$$

$$\psi_{H_2,4} = \frac{k_{gs} S_{gs}}{\varepsilon_g}; \psi_{H_2,5} = \frac{k_{r,2} f(2)}{\varepsilon_g}; \psi_{H_2,6} = \frac{4Q_g}{\pi d_c^2 D_{H_2}}; \psi_{H_2,7} = \frac{2 + \psi_{H_2,6} \Delta z}{2 - \psi_{H_2,6} \Delta z} \quad (H.2)$$

$$\psi_{H_2,8} = \frac{2\psi_{H_2,6} \Delta z Y_{H_2,0}}{2 - \psi_{H_2,6} \Delta z}; \psi_{H_2,9} = \frac{2 - \psi_{H_2,6} \Delta z}{2 + \psi_{H_2,6} \Delta z}; \psi_{H_2,10} = \frac{2\psi_{H_2,6} \Delta z Y_{H_2,0}}{2 + \psi_{H_2,6} \Delta z} \quad (H.3)$$

$$\psi_{H_2,11} = \psi_{H_2,1} \psi_{H_2,7} + \psi_{H_2,2} \psi_{H_2,9} + \phi_{H_2,3}; \psi_{H_2,12} = \psi_{H_2,2} \psi_{H_2,10} - \psi_{H_2,1} \psi_{H_2,8} \quad (H.4)$$

APÊNDICE (I): COEFICIENTES REFERENTES À EQUAÇÃO (A-8)

$$\sigma_{C(s),1} = \frac{D_{C(s)}}{(\Delta z)^2} - \frac{2N_s}{\pi d_c^2 \Delta z}; \sigma_{C(s),2} = \frac{D_{C(s)}}{(\Delta z)^2} + \frac{2N_s}{\pi d_c^2 \Delta z}; \sigma_{C(s),3} = \frac{2D_{C(s)}}{(\Delta z)^2} - \frac{k_{gs} S_{gs}}{\varepsilon_s} \quad (1.1)$$

$$\sigma_{C(s),4} = \frac{k_{gs} S_{gs}}{\varepsilon_s}; \sigma_{C(s),5} = 12 \alpha \frac{\varepsilon_{g,mf}}{d_p^2 \varepsilon_s} D_{O_2}; \sigma_{C(s),6} = \frac{4N_s}{D_{C(s)} \pi d_c^2}; \sigma_{C(s),7} = \frac{2 + \sigma_{C(s),6} \Delta z}{2 - \sigma_{C(s),6} \Delta z} \quad (1.2)$$

$$\sigma_{C(s),8} = \frac{2 \sigma_{C(s),6} \Delta z Y_{C(s),0}}{2 - \sigma_{C(s),6} \Delta z}; \sigma_{C(s),9} = \frac{2 - \sigma_{C(s),6} \Delta z}{2 + \sigma_{C(s),6} \Delta z}; \sigma_{C(s),10} = \frac{2 \sigma_{C(s),6} \Delta z Y_{C(s),0}}{2 + \sigma_{C(s),6} \Delta z} \quad (1.3)$$

$$\sigma_{C(s),11} = \sigma_{C(s),1} \sigma_{C(s),7} + \sigma_{C(s),2} \sigma_{C(s),9} - \sigma_{C(s),3}; \sigma_{C(s),12} = \sigma_{C(s),1} \sigma_{C(s),8} - \sigma_{C(s),2} \sigma_{C(s),10} \quad (1.4)$$

A partir do sistema de EDOs dado pelas Equações (A-1) a (A-8) tem sido possível implementar o **método de Runge-Kutta Gill** como segue o procedimento passo a passo abaixo.

PRIMEIRO PASSO MÉTODO DE RUNGE-KUTTA GILL:

$$k_1 = h f \left[t^k, z^j, (T_g)_j^k, (T_s)_j^k, (Y_{O_2})_j^k, (Y_{CO})_j^k, (Y_{CO_2})_j^k, (Y_{H_2O})_j^k, (Y_{H_2})_j^k, (Y_{C(s)})_j^k \right] = h \left[\alpha_{g,11} (T_g)_j^k - \alpha_{g,4} (T_s)_j^k + \alpha_{g,5} (T_{\omega})_j^k + \alpha_{g,12} \right] \quad (J.1)$$

$$l_1 = h f \left[t^k, z^j, (T_g)_j^k, (T_s)_j^k, (Y_{O_2})_j^k, (Y_{CO})_j^k, (Y_{CO_2})_j^k, (Y_{H_2O})_j^k, (Y_{H_2})_j^k, (Y_{C(s)})_j^k \right] = h \left[\beta_{s,13} (T_s)_j^k + \beta_{s,4} (T_g)_j^k + \beta_{s,5} (T_{\omega})_j^k + \beta_{s,6} (C_{O_2})_j^k + \beta_{s,7} \frac{(C_{H_2O})_j^k}{(P_i)_j^k} + \beta_{s,14} \right] \quad (J.2)$$

$$m_1 = h f \left[t^k, z^j, (T_g)_j^k, (T_s)_j^k, (Y_{O_2})_j^k, (Y_{CO})_j^k, (Y_{CO_2})_j^k, (Y_{H_2O})_j^k, (Y_{H_2})_j^k, (Y_{C(s)})_j^k \right] = h \left[\gamma_{O_2,11} (Y_{O_2})_j^k - \gamma_{O_2,4} (Y_{C(s)})_j^k - \gamma_{O_2,5} (C_{O_2})_j^k + \gamma_{O_2,12} \right] \quad (J.3)$$

$$n_1 = h f \left[t^k, z^j, (T_g)_j^k, (T_s)_j^k, (Y_{O_2})_j^k, (Y_{CO})_j^k, (Y_{CO_2})_j^k, (Y_{H_2O})_j^k, (Y_{H_2})_j^k, (Y_{C(s)})_j^k \right] = h \left[\nu_{CO,12} (Y_{CO})_j^k - \nu_{CO,4} (Y_{C(s)})_j^k + \nu_{CO,5} (C_{O_2})_j^k + \nu_{CO,6} \frac{(Y_{H_2O})_j^k}{(P_i)_j^k} + \nu_{CO,13} \right] \quad (J.4)$$

$$p_1 = h f \left[t^k, z^j, (T_g)_j^k, (T_s)_j^k, (Y_{O_2})_j^k, (Y_{CO})_j^k, (Y_{CO_2})_j^k, (Y_{H_2O})_j^k, (Y_{H_2})_j^k, (Y_{C(s)})_j^k \right] = h$$

$$\left[\vartheta_{CO_2,12} (Y_{CO_2})_j^k - \vartheta_{CO_2,4} (Y_{C(s)})_j^k + \vartheta_{CO_2,5} (C_{O_2})_j^k + \vartheta_{CO_2,6} \frac{(Y_{H_2O})_j^k}{(P_i)_j^k} + \vartheta_{CO_2,13} \right] \quad (J.5)$$

$$r_1 = h f \left[t^k, z^j, (T_g)_j^k, (T_s)_j^k, (Y_{O_2})_j^k, (Y_{CO})_j^k, (Y_{CO_2})_j^k, (Y_{H_2O})_j^k, (Y_{H_2})_j^k, (Y_{C(s)})_j^k \right] = h$$

$$\left[\phi_{H_2O,11} (Y_{H_2O})_j^k - \phi_{H_2O,4} (Y_{C(s)})_j^k - \phi_{H_2O,5} \frac{(Y_{H_2O})_j^k}{(P_i)_j^k} + \phi_{H_2O,12} \right] \quad (J.6)$$

$$q_1 = h f \left[t^k, z^j, (T_g)_j^k, (T_s)_j^k, (Y_{O_2})_j^k, (Y_{CO})_j^k, (Y_{CO_2})_j^k, (Y_{H_2O})_j^k, (Y_{H_2})_j^k, (Y_{C(s)})_j^k \right] = h$$

$$\left[\psi_{H_2,11} (Y_{H_2})_j^k - \psi_{H_2,4} (Y_{C(s)})_j^k + \psi_{H_2,5} \frac{(Y_{H_2O})_j^k}{(P_i)_j^k} + \psi_{H_2,12} \right] \quad (J.7)$$

$$s_1 = h f \left[t^k, z^j, (T_g)_j^k, (T_s)_j^k, (Y_{O_2})_j^k, (Y_{CO})_j^k, (Y_{CO_2})_j^k, (Y_{H_2O})_j^k, (Y_{H_2})_j^k, (Y_{C(s)})_j^k \right] = h$$

$$\left\{ \sigma_{C(s),11} + (Y_{C(s)})_j^k - \sigma_{C(s),4} (\bar{Y}_i)_j^k + \sigma_{C(s),5} (C_{O_2})_j^k - 4,45 \exp \left[\frac{-E_a}{R(T_s)_j^k} \right] - \sigma_{C(s),12} \right\} \quad (J.8)$$

SEGUNDO PASSO DO MÉTODO DE RUNGE-KUTTA GILL:

$$\begin{aligned}
 k_2 = h f \left[t^k + \frac{h}{2}, z^j + \frac{\Delta z}{2}, (T_g)_j^k + \frac{k_1}{2}, (T_s)_j^k + \frac{l_1}{2}, (Y_{O_2})_j^k + \frac{m_1}{2}, (Y_{CO})_j^k + \frac{n_1}{2}, (Y_{CO_2})_j^k + \frac{p_1}{2}, \right. \\
 \left. (Y_{H_2O})_j^k + \frac{r_1}{2}, (Y_{H_2})_j^k + \frac{q_1}{2}, (Y_{C(s)})_j^k + \frac{s_1}{2} \right] = h \left\{ \alpha_{g,11} \left[(T_g)_j^k + \frac{k_1}{2} \right] - \alpha_{g,4} \left[(T_s)_j^k + \frac{l_1}{2} \right] - \right. \\
 \left. - (T_\omega)_j^k + \alpha_{g,12} \right\} \quad (J.9)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 l_2 = h f \left[t^k + \frac{h}{2}, z^j + \frac{\Delta z}{2}, (T_g)_j^k + \frac{k_1}{2}, (T_s)_j^k + \frac{l_1}{2}, (Y_{O_2})_j^k + \frac{m_1}{2}, (Y_{CO})_j^k + \frac{n_1}{2}, (Y_{CO_2})_j^k + \frac{p_1}{2}, \right. \\
 \left. (Y_{H_2O})_j^k + \frac{r_1}{2}, (Y_{H_2})_j^k + \frac{q_1}{2}, (Y_{C(s)})_j^k + \frac{s_1}{2} \right] = h \left\{ \beta_{s,13} \left[(T_s)_j^k + \frac{l_1}{2} \right] + \beta_{s,4} \left[(T_g)_j^k + \frac{k_1}{2} \right] + \right. \\
 \left. + \beta_{s,5} (T_\omega)_j^k + \beta_{s,6} \left[(C_{O_2})_j^k + \frac{m_1}{2} \right] + \beta_{s,7} \frac{\left[(Y_{H_2O})_j^k + \frac{r_1}{2} \right]}{(P_i)_j^k} + \beta_{s,14} \right\} \quad (J.10)
 \end{aligned}$$

$$m_2 = hf \left[t^k + \frac{h}{2}, z^j + \frac{\Delta z}{2}, (T_g)_j^k + \frac{k_1}{2}, (T_s)_j^k + \frac{l_1}{2}, (Y_{O_2})_j^k + \frac{m_1}{2}, (Y_{CO})_j^k + \frac{n_1}{2}, (Y_{CO_2})_j^k + \frac{p_1}{2}, \right. \\ \left. (Y_{H_2O})_j^k + \frac{r_1}{2}, (Y_{H_2})_j^k + \frac{q_1}{2}, (Y_{C(s)})_j^k + \frac{s_1}{2} \right] = h \left\{ \gamma_{O_2,11} \left[(Y_{O_2})_j^k + \frac{m_1}{2} \right] - \gamma_{O_2,4} \left[(Y_{C(s)})_j^k + \frac{s_1}{2} \right] - \right. \\ \left. - \gamma_{O_2,5} \left[(C_{O_2})_j^k + \frac{m_1}{2} \right] + \gamma_{O_2,12} \right\} \quad (J.11)$$

$$n_2 = hf \left[t^k + \frac{h}{2}, z^j + \frac{\Delta z}{2}, (T_g)_j^k + \frac{k_1}{2}, (T_s)_j^k + \frac{l_1}{2}, (Y_{O_2})_j^k + \frac{m_1}{2}, (Y_{CO})_j^k + \frac{n_1}{2}, (Y_{CO_2})_j^k + \frac{p_1}{2}, \right. \\ \left. (Y_{H_2O})_j^k + \frac{r_1}{2}, (Y_{H_2})_j^k + \frac{q_1}{2}, (Y_{C(s)})_j^k + \frac{s_1}{2} \right] = h \left\{ \nu_{CO,12} \left[(Y_{CO})_j^k + \frac{n_1}{2} \right] - \nu_{CO,4} \left[(Y_{C(s)})_j^k + \frac{s_1}{2} \right] \right. \\ \left. + \nu_{CO,5} \left[(C_{O_2})_j^k + \frac{m_1}{2} \right] + \nu_{CO,6} \frac{\left[(C_{H_2O})_j^k + \frac{r_1}{2} \right]}{(P_i)_j^k} + \nu_{CO,13} \right\} \quad (J.12)$$

$$p_2 = hf \left[t^k + \frac{h}{2}, z^j + \frac{\Delta z}{2}, (T_g)_j^k + \frac{k_1}{2}, (T_s)_j^k + \frac{l_1}{2}, (Y_{O_2})_j^k + \frac{m_1}{2}, (Y_{CO})_j^k + \frac{n_1}{2}, (Y_{CO_2})_j^k + \frac{p_1}{2}, \right. \\ \left. (Y_{H_2O})_j^k + \frac{r_1}{2}, (Y_{H_2})_j^k + \frac{q_1}{2}, (Y_{C(s)})_j^k + \frac{s_1}{2} \right] = h \left\{ \vartheta_{CO_2,12} \left[(Y_{CO_2})_j^k + \frac{p_1}{2} \right] - \vartheta_{CO_2,4} \left[(Y_{C(s)})_j^k + \frac{s_1}{2} \right] \right. \\ \left. + \vartheta_{CO_2,5} \left[(C_{O_2})_j^k + \frac{m_1}{2} \right] + \vartheta_{CO_2,6} \frac{\left[(C_{H_2O})_j^k + \frac{r_1}{2} \right]}{(P_i)_j^k} + \vartheta_{CO_2,13} \right\} \quad (J.13)$$

$$r_2 = hf \left[t^k + \frac{h}{2}, z^j + \frac{\Delta z}{2}, (T_g)_j^k + \frac{k_1}{2}, (T_s)_j^k + \frac{l_1}{2}, (Y_{O_2})_j^k + \frac{m_1}{2}, (Y_{CO})_j^k + \frac{n_1}{2}, (Y_{CO_2})_j^k + \frac{p_1}{2}, \right. \\ \left. (Y_{H_2O})_j^k + \frac{r_1}{2}, (Y_{H_2})_j^k + \frac{q_1}{2}, (Y_{C(s)})_j^k + \frac{s_1}{2} \right] = h \left\{ \phi_{H_2O,11} \left[(Y_{H_2O})_j^k + \frac{r_1}{2} \right] - \phi_{H_2O,4} \left[(Y_{C(s)})_j^k + \frac{s_1}{2} \right] - \right. \\ \left. - \phi_{H_2O,5} \frac{\left[(C_{H_2O})_j^k + \frac{r_1}{2} \right]}{(P_i)_j^k} + \phi_{CO_2,12} \right\} \quad (J.14)$$

$$q_2 = hf \left[t^k + \frac{h}{2}, z^j + \frac{\Delta z}{2}, (T_g)_j^k + \frac{k_1}{2}, (T_s)_j^k + \frac{l_1}{2}, (Y_{O_2})_j^k + \frac{m_1}{2}, (Y_{CO})_j^k + \frac{n_1}{2}, (Y_{CO_2})_j^k + \frac{p_1}{2}, \right. \\ \left. (Y_{H_2O})_j^k + \frac{r_1}{2}, (Y_{H_2})_j^k + \frac{q_1}{2}, (Y_{C(s)})_j^k + \frac{s_1}{2} \right] = h \left\{ \psi_{H_2,11} \left[(Y_{H_2})_j^k + \frac{q_1}{2} \right] - \psi_{H_2,4} \left[(Y_{C(s)})_j^k + \frac{s_1}{2} \right] + \right. \\ \left. + \psi_{H_2,5} \frac{\left[(C_{H_2O})_j^k + \frac{r_1}{2} \right]}{(P_i)_j^k} + \psi_{CO_2,12} \right\} \quad (J.15)$$

$$\begin{aligned}
s_2 = hf \left[t^k + \frac{h}{2}, z^j + \frac{\Delta z}{2}, (T_g)_j^k + \frac{k_1}{2}, (T_s)_j^k + \frac{l_1}{2}, (Y_{O_2})_j^k + \frac{m_1}{2}, (Y_{CO})_j^k + \frac{n_1}{2}, (Y_{CO_2})_j^k + \frac{p_1}{2}, \right. \\
\left. (Y_{H_2O})_j^k + \frac{r_1}{2}, (Y_{H_2})_j^k + \frac{q_1}{2}, (Y_{C(s)})_j^k + \frac{s_1}{2} \right] = h \left\{ \sigma_{C(s),11} \left[(Y_{C(s)})_j^k + \frac{s_1}{2} \right] - \sigma_{C(s),4} \left[(\bar{Y}_i)_j^k \right] + \right. \\
\left. \sigma_{C(s),5} \left[(C_{O_2})_j^k + \frac{m_1}{2} \right] - 4,45 \exp \left[\frac{-E_a}{R (T_s)_j^k} \right] - \sigma_{C(s),12} \right\} \quad (J.16)
\end{aligned}$$

onde,

$$(P_i)_j^k = 1 + K_{2,H_2O} \left[(C_{H_2O})_j^k + \frac{r_1}{2} \right] + K_{2,H_2} \left[(C_{H_2})_j^k + \frac{q_1}{2} \right] + K_{2,CO} \left[(C_{CO})_j^k + \frac{n_1}{2} \right]$$

TERCEIRO PASSO DO MÉTODO DE RUNGE-KUTTA GILL:

$$\begin{aligned}
 k_3 = h f \left[t^k + \frac{h}{2}, z^j + \frac{\Delta z}{2}, (T_g)_j^k + a k_1 + b k_2, (T_s)_j^k + a l_1 + b l_2, (Y_{O_2})_j^k + a m_1 + b m_2, (Y_{CO})_j^k + \right. \\
 \left. + a n_1 + b n_2, (Y_{CO_2})_j^k + a p_1 + b p_2, (Y_{H_2O})_j^k + a r_1 + b r_2, (Y_{H_2})_j^k + a q_1 + b q_2, (Y_{C(s)})_j^k + a s_1 \right. \\
 \left. + b s_2 \right] = h \left\{ \alpha_{g,11} \left[(T_g)_j^k + a k_1 + b k_2 \right] - \alpha_{g,4} \left[(T_s)_j^k + a l_1 + b l_2 \right] + \alpha_{g,5} (T_\omega)_j^k + \alpha_{g,12} \right\} \quad (J.17)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 l_3 = h f \left[t^k + \frac{h}{2}, z^j + \frac{\Delta z}{2}, (T_g)_j^k + a k_1 + b k_2, (T_s)_j^k + a l_1 + b l_2, (Y_{O_2})_j^k + a m_1 + b m_2, (Y_{CO})_j^k + \right. \\
 \left. + a n_1 + b n_2, (Y_{CO_2})_j^k + a p_1 + b p_2, (Y_{H_2O})_j^k + a r_1 + b r_2, (Y_{H_2})_j^k + a q_1 + b q_2, (Y_{C(s)})_j^k + a s_1 \right. \\
 \left. + b s_2 \right] = h \left\{ \beta_{s,13} \left[(T_s)_j^k + a l_1 + b l_2 \right] + \beta_{s,4} \left[(T_g)_j^k + a k_1 + b k_2 \right] + \beta_{s,5} (T_\omega)_j^k + \beta_{s,6} \left[(C_{O_2})_j^k \right. \right. \\
 \left. \left. + a m_1 + b m_2 \right] + \beta_{s,7} \frac{\left[(C_{H_2O})_j^k + a r_1 + b r_2 \right]}{(P_i)_j^k} + \beta_{s,14} \right\} \quad (J.18)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 m_3 = h f \left[t^k + \frac{h}{2}, z^j + \frac{\Delta z}{2}, (T_g)_j^k + a k_1 + b k_2, (T_s)_j^k + a l_1 + b l_2, (Y_{O_2})_j^k + a m_1 + b m_2, (Y_{CO})_j^k + \right. \\
 \left. + a n_1 + b n_2, (Y_{CO_2})_j^k + a p_1 + b p_2, (Y_{H_2O})_j^k + a r_1 + b r_2, (Y_{H_2})_j^k + a q_1 + b q_2, (Y_{C(s)})_j^k + a s_1 \right. \\
 \left. + b s_2 \right] = h \left\{ \gamma_{O_2,11} \left[(Y_{O_2})_j^k + a m_1 + b m_2 \right] - \gamma_{O_2,4} \left[(Y_{C(s)})_j^k + a s_1 + b s_2 \right] - \gamma_{O_2,5} \left[(C_{O_2})_j^k \right. \right. \\
 \left. \left. + a m_1 + b m_2 \right] + \gamma_{O_2,12} \right\} \quad (J.19)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
n_3 = h f \left[t^k + \frac{h}{2}, z^j + \frac{\Delta z}{2}, (T_g)_j^k + a k_1 + b k_2, (T_s)_j^k + a l_1 + b l_2, (Y_{O_2})_j^k + a m_1 + b m_2, (Y_{CO})_j^k + \right. \\
\left. + a n_1 + b n_2, (Y_{CO_2})_j^k + a p_1 + b p_2, (Y_{H_2O})_j^k + a r_1 + b r_2, (Y_{H_2})_j^k + a q_1 + b q_2, (Y_{C(s)})_j^k + a s_1 \right. \\
\left. + b s_2 \right] = h \left\{ v_{CO,12} \left[(Y_{CO})_j^k + a n_1 + b n_2 \right] - v_{CO,4} \left[(Y_{C(s)})_j^k + a s_1 + b s_2 \right] + v_{CO,5} \left[(C_{O_2})_j^k + \right. \right. \\
\left. \left. + a m_1 + b m_2 \right] + v_{CO,6} \frac{\left[(C_{H_2O})_j^k + a r_1 + b r_2 \right]}{(P_i)_j^k} + v_{CO,13} \right\}
\end{aligned} \quad (J.20)$$

$$\begin{aligned}
p_3 = h f \left[t^k + \frac{h}{2}, z^j + \frac{\Delta z}{2}, (T_g)_j^k + a k_1 + b k_2, (T_s)_j^k + a l_1 + b l_2, (Y_{O_2})_j^k + a m_1 + b m_2, (Y_{CO})_j^k + \right. \\
\left. + a n_1 + b n_2, (Y_{CO_2})_j^k + a p_1 + b p_2, (Y_{H_2O})_j^k + a r_1 + b r_2, (Y_{H_2})_j^k + a q_1 + b q_2, (Y_{C(s)})_j^k + a s_1 \right. \\
\left. + b s_2 \right] = h \left\{ g_{CO_2,12} \left[(Y_{CO_2})_j^k + a p_1 + b p_2 \right] - g_{CO_2,4} \left[(Y_{C(s)})_j^k + a s_1 + b s_2 \right] + g_{CO_2,5} \left[(C_{O_2})_j^k + \right. \right. \\
\left. \left. + a m_1 + b m_2 \right] + v_{CO_2,6} \frac{\left[(C_{H_2O})_j^k + a r_1 + b r_2 \right]}{(P_i)_j^k} + v_{CO_2,13} \right\}
\end{aligned} \quad (J.21)$$

$$\begin{aligned}
r_3 = h f \left[t^k + \frac{h}{2}, z^j + \frac{\Delta z}{2}, (T_g)_j^k + a k_1 + b k_2, (T_s)_j^k + a l_1 + b l_2, (Y_{O_2})_j^k + a m_1 + b m_2, (Y_{CO})_j^k + \right. \\
\left. + a n_1 + b n_2, (Y_{CO_2})_j^k + a p_1 + b p_2, (Y_{H_2O})_j^k + a r_1 + b r_2, (Y_{H_2})_j^k + a q_1 + b q_2, (Y_{C(s)})_j^k + \right. \\
\left. + a s_1 + b s_2 \right] = h \left\{ \phi_{H_2O,11} \left[(Y_{H_2O})_j^k + a r_1 + b r_2 \right] - \phi_{H_2O,4} \left[(Y_{C(s)})_j^k + a s_1 + b s_2 \right] - \phi_{H_2O,5} \right. \\
\left. \frac{\left[(C_{H_2O})_j^k + a r_1 + b r_2 \right]}{(P_i)_j^k} + \phi_{H_2O,12} \right\}
\end{aligned} \quad (J.22)$$

$$\begin{aligned}
q_3 = h f \left[t^k + \frac{h}{2}, z^j + \frac{\Delta z}{2}, (T_g)_j^k + a k_1 + b k_2, (T_s)_j^k + a l_1 + b l_2, (Y_{O_2})_j^k + a m_1 + b m_2, (Y_{CO})_j^k + \right. \\
\left. + a n_1 + b n_2, (Y_{CO_2})_j^k + a p_1 + b p_2, (Y_{H_2O})_j^k + a r_1 + b r_2, (Y_{H_2})_j^k + a q_1 + b q_2, (Y_{C(s)})_j^k + \right. \\
\left. + a s_1 + b s_2 \right] = h \left\{ \psi_{H_2,11} \left[(Y_{H_2})_j^k + a q_1 + b q_2 \right] - \psi_{H_2,4} \left[(Y_{C(s)})_j^k + a s_1 + b s_2 \right] + \psi_{H_2,5} \right. \\
\left. \frac{\left[(C_{H_2O})_j^k + a r_1 + b r_2 \right]}{(P_i)_j^k} + \psi_{H_2,12} \right\}
\end{aligned} \quad (J.23)$$

$$\begin{aligned}
s_3 = h f \left[t^k + \frac{h}{2}, z^j + \frac{\Delta z}{2}, (T_g)_j^k + a k_1 + b k_2, (T_s)_j^k + a l_1 + b l_2, (Y_{O_2})_j^k + a m_1 + b m_2, (Y_{CO})_j^k \right. \\
+ a n_1 + b n_2, (Y_{CO_2})_j^k + a p_1 + b p_2, (Y_{H_2O})_j^k + a r_1 + b r_2, (Y_{H_2})_j^k + a q_1 + b q_2, (Y_{C(s)})_j^k + \\
\left. a s_1 + b s_2 \right] = h \left\{ \sigma_{(s),11} \left[(Y_{C(s)})_j^k + a s_1 + b s_2 \right] - \sigma_{(s),4} (\bar{Y}_i)_j^k + \sigma_{(s),5} \left[(C_{O_2})_j^k + a m_1 + b m_2 \right] \right. \\
\left. - 4,45 \exp \left[\frac{-E_a}{R \left[(T_s)_j^k + a l_1 + b l_2 \right]} \right] - \sigma_{(s),12} \right\}
\end{aligned} \quad (J.24)$$

Onde,

$$(P_i)_j^k = 1 + K_{2,H_2O} \left[(C_{H_2O})_j^k + a r_1 + b r_2 \right] + K_{2,H_2} \left[(C_{H_2})_j^k + a q_1 + b q_2 \right] + K_{2,CO} \left[(C_{CO})_j^k + a n_1 + b n_2 \right]$$

QUARTO PASSO DO MÉTODO DE RUNGE-KUTTA GILL:

$$\begin{aligned}
 k_4 = h f \left[t^k + h, z^j + \Delta z, (T_g)_j^k + c k_2 + d k_3, (T_s)_j^k + c l_2 + d l_3, (Y_{O_2})_j^k + c m_2 + d m_3, (Y_{CO})_j^k + \right. \\
 \left. + c n_2 + d n_3, (Y_{CO_2})_j^k + c p_2 + d p_3, (Y_{H_2O})_j^k + c r_2 + d r_3, (Y_{H_2})_j^k + c q_2 + d q_3, (Y_{C(s)})_j^k + c s_2 \right. \\
 \left. + d s_3 \right] = h \left\{ \alpha_{g,11} \left[(T_g)_j^k + c k_2 + d k_3 \right] - \alpha_{g,4} \left[(T_s)_j^k + c l_2 + d l_3 \right] + \alpha_{g,5} (T_\omega)_j^k + \alpha_{g,12} \right\}
 \end{aligned} \quad (J.25)$$

$$\begin{aligned}
 l_4 = h f \left[t^k + h, z^j + \Delta z, (T_g)_j^k + c k_2 + d k_3, (T_s)_j^k + c l_2 + d l_3, (Y_{O_2})_j^k + c m_2 + d m_3, (Y_{CO})_j^k + \right. \\
 \left. + c n_2 + d n_3, (Y_{CO_2})_j^k + c p_2 + d p_3, (Y_{H_2O})_j^k + c r_2 + d r_3, (Y_{H_2})_j^k + c q_2 + d q_3, (Y_{C(s)})_j^k + c s_2 \right. \\
 \left. + d s_3 \right] = h \left\{ \beta_{s,13} \left[(T_s)_j^k + c l_2 + d l_3 \right] + \beta_{s,4} \left[(T_g)_j^k + c k_2 + d k_3 \right] + \beta_{s,5} (T_\omega)_j^k + \beta_{s,6} \left[(CO_2)_j^k \right. \right. \\
 \left. \left. + c m_2 + d m_3 \right] + \beta_{s,7} \frac{\left[(CH_2O)_j^k + c r_2 + d r_3 \right]}{(P_i)_j^k} + \beta_{s,14} \right\}
 \end{aligned} \quad (J.26)$$

$$\begin{aligned}
 m_4 = h f \left[t^k + h, z^j + \Delta z, (T_g)_j^k + c k_2 + d k_3, (T_s)_j^k + c l_2 + d l_3, (Y_{O_2})_j^k + c m_2 + d m_3, (Y_{CO})_j^k + \right. \\
 \left. + c n_2 + d n_3, (Y_{CO_2})_j^k + c p_2 + d p_3, (Y_{H_2O})_j^k + c r_2 + d r_3, (Y_{H_2})_j^k + c q_2 + d q_3, (Y_{C(s)})_j^k + c s_2 \right. \\
 \left. + d s_3 \right] = h \left\{ \gamma_{O_2,11} \left[(Y_{O_2})_j^k + c m_2 + d m_3 \right] - \gamma_{O_2,4} \left[(Y_{C(s)})_j^k + c s_2 + d s_3 \right] - \gamma_{O_2,5} \left[(CO_2)_j^k \right. \right. \\
 \left. \left. + c m_2 + d m_3 \right] + \gamma_{O_2,12} \right\}
 \end{aligned} \quad (J.27)$$

$$\begin{aligned}
n_4 = h f & \left[t^k + h, z^j + \Delta z, (T_g)_j^k + c k_2 + d k_3, (T_s)_j^k + c l_2 + d l_3, (Y_{O_2})_j^k + c m_2 + d m_3, (Y_{CO})_j^k + \right. \\
& + c n_2 + d n_3, (Y_{CO_2})_j^k + c p_2 + d p_3, (Y_{H_2O})_j^k + c r_2 + d r_3, (Y_{H_2})_j^k + c q_2 + d q_3, (Y_{C(s)})_j^k + c s_2 \\
& + d s_3 \left. \right] = h \left\{ v_{CO,12} \left[(Y_{CO})_j^k + c n_2 + d n_3 \right] - v_{CO,4} \left[(Y_{C(s)})_j^k + c s_2 + d s_3 \right] + v_{CO,5} \left[(CO_2)_j^k + \right. \right. \\
& + c m_2 + d m_3 \left. \right] + v_{CO,6} \frac{\left[(C_{H_2O})_j^k + c r_2 + d r_3 \right]}{(P_i)_j^k} + v_{CO,13} \left. \right\}
\end{aligned} \tag{J.28}$$

$$\begin{aligned}
p_4 = h f & \left[t^k + h, z^j + \Delta z, (T_g)_j^k + c k_2 + d k_3, (T_s)_j^k + c l_2 + d l_3, (Y_{O_2})_j^k + c m_2 + d m_3, (Y_{CO})_j^k + \right. \\
& + c n_2 + d n_3, (Y_{CO_2})_j^k + c p_2 + d p_3, (Y_{H_2O})_j^k + c r_2 + d r_3, (Y_{H_2})_j^k + c q_2 + d q_3, (Y_{C(s)})_j^k + c s_2 \\
& + d s_3 \left. \right] = h \left\{ g_{CO_2,12} \left[(Y_{CO_2})_j^k + c p_2 + d p_3 \right] - g_{CO_2,4} \left[(Y_{C(s)})_j^k + c s_2 + d s_3 \right] + g_{CO_2,5} \left[(CO_2)_j^k + \right. \right. \\
& + c m_2 + d m_3 \left. \right] + v_{CO_2,6} \frac{\left[(C_{H_2O})_j^k + c r_2 + d r_3 \right]}{(P_i)_j^k} + v_{CO_2,13} \left. \right\}
\end{aligned} \tag{J.29}$$

$$\begin{aligned}
r_4 = h f & \left[t^k + h, z^j + \Delta z, (T_g)_j^k + c k_2 + d k_3, (T_s)_j^k + c l_2 + d l_3, (Y_{O_2})_j^k + c m_2 + d m_3, (Y_{CO})_j^k + \right. \\
& + c n_2 + d n_3, (Y_{CO_2})_j^k + c p_2 + d p_3, (Y_{H_2O})_j^k + c r_2 + d r_3, (Y_{H_2})_j^k + c q_2 + d q_3, (Y_{C(s)})_j^k + \\
& c s_2 + d s_3 \left. \right] = h \left\{ \phi_{H_2O,11} \left[(Y_{H_2O})_j^k + c r_2 + d r_3 \right] - \phi_{H_2O,4} \left[(Y_{C(s)})_j^k + c s_2 + d s_3 \right] - \phi_{H_2O,5} \right. \\
& \left. \frac{\left[(C_{H_2O})_j^k + c r_2 + d r_3 \right]}{(P_i)_j^k} + \phi_{H_2O,12} \right\}
\end{aligned} \tag{J.30}$$

$$\begin{aligned}
q_4 = h f & \left[t^k + h, z^j + \Delta z, (T_g)_j^k + c k_2 + d k_3, (T_s)_j^k + c l_2 + d l_3, (Y_{O_2})_j^k + c m_2 + d m_3, (Y_{CO})_j^k + \right. \\
& + c n_2 + d n_3, (Y_{CO_2})_j^k + c p_2 + d p_3, (Y_{H_2O})_j^k + c r_2 + d r_3, (Y_{H_2})_j^k + c q_2 + d q_3, (Y_{C(s)})_j^k + \\
& c s_2 + d s_3 \left. \right] = h \left\{ \psi_{H_2,11} \left[(Y_{H_2})_j^k + c q_2 + d q_3 \right] - \psi_{H_2,4} \left[(Y_{C(s)})_j^k + c s_2 + d s_3 \right] + \psi_{H_2,5} \right. \\
& \left. \frac{\left[(C_{H_2O})_j^k + c r_2 + d r_3 \right]}{(P_i)_j^k} + \psi_{H_2,12} \right\}
\end{aligned} \tag{J.31}$$

$$\begin{aligned}
s_4 = h f & \left[t^k + h, z^j + \Delta z, (T_g)_j^k + c k_2 + d k_3, (T_s)_j^k + c l_2 + d l_3, (Y_{O_2})_j^k + c m_3 + d m_3, (Y_{CO})_j^k \right. \\
& + c n_2 + d n_3, (Y_{CO_2})_j^k + c p_2 + d p_3, (Y_{H_2O})_j^k + c r_2 + d r_3, (Y_{H_2})_j^k + c q_2 + d q_3, (Y_{C(s)})_j^k + \\
& c s_2 + d s_3 \left. \right] = h \left\{ \sigma_{(s),11} \left[(Y_{C(s)})_j^k + c s_2 + d s_3 \right] - \sigma_{(s),4} (\bar{Y}_i)_j^k + \sigma_{(s),5} \left[(C_{O_2})_j^k + c m_2 + d m_3 \right] \right. \\
& \left. - 4,45 \exp \left[\frac{-E_a}{R \left[(T_s)_j^k + c l_2 + d l_3 \right]} \right] - \sigma_{(s),12} \right\}
\end{aligned} \quad (J.32)$$

Onde,

$$(P_i)_j^k = 1 + K_{2,H_2O} \left[(C_{H_2O})_j^k + c r_2 + d r_3 \right] + K_{2,H_2} \left[(C_{H_2})_j^k + c q_2 + d q_3 \right] + K_{2,CO} \left[(C_{CO})_j^k + c n_2 + d n_3 \right]$$

EQUAÇÕES ITERATIVAS PARA O MÉTODO DE RANGE – KUTTA GILL

As equações iterativas para as variáveis de processos são descritas como segue.

$$(T_g)_j^{(k+1)} = (T_g)_j^k + \left[\frac{1}{6}(k_1 + k_4) + \frac{1}{3}(bk_2 + dk_3) \right] \quad (\text{J.33})$$

$$(T_s)_j^{(k+1)} = (T_s)_j^k + \left[\frac{1}{6}(l_1 + l_4) + \frac{1}{3}(bl_2 + dl_3) \right] \quad (\text{J.34})$$

$$(Y_{O_2})_j^{(k+1)} = (Y_{O_2})_j^k - \left[\frac{1}{6}(m_1 + m_4) + \frac{1}{3}(bm_2 + dm_3) \right] \quad (\text{J.35})$$

$$(Y_{CO})_j^{(k+1)} = (Y_{CO})_j^k + \left[\frac{1}{6}(n_1 + n_4) + \frac{1}{3}(bn_2 + dn_3) \right] \quad (\text{J.36})$$

$$(Y_{CO_2})_j^{(k+1)} = (Y_{CO_2})_j^k + \left[\frac{1}{6}(p_1 + p_4) + \frac{1}{3}(bp_2 + dp_3) \right] \quad (\text{J.37})$$

$$(Y_{H_2O})_j^{(k+1)} = (Y_{H_2O})_j^k - \left[\frac{1}{6}(r_1 + r_4) + \frac{1}{3}(br_2 + dr_3) \right] \quad (\text{J.38})$$

$$(Y_{H_2})_j^{(k+1)} = (Y_{H_2})_j^k + \left[\frac{1}{6}(q_1 + q_4) + \frac{1}{3}(bq_2 + dq_3) \right] \quad (\text{J.39})$$

$$(Y_{C(s)})_j^{(k+1)} = (Y_{C(s)})_j^k - \left[\frac{1}{6}(s_1 + s_4) + \frac{1}{3}(bs_2 + ds_3) \right] \quad (\text{J.40})$$

Onde,

$$a = \frac{(\sqrt{2} - 1)}{2}, \quad b = \frac{(2 - \sqrt{2})}{2}, \quad c = -\frac{\sqrt{2}}{2} \quad \text{e} \quad d = 1 + \frac{\sqrt{2}}{2}$$



conhecimentolivre.org/home



contato@conhecimentolivre.org



[editoraconhecimentolivre](https://www.instagram.com/editoraconhecimentolivre)

AVALIAÇÃO DINÂMICA DE UM GASEIFICADOR DE LEITO FLUIDIZADO BORBULHANTE: MODELAGEM MATEMÁTICA E SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Darlan Antônio Andrade Moutinho Junior
Jornandes Dias da Silva