

## Investigação da gaseificação de madeira de eucalipto

## Investigation of eucalyptus wood gasification

### RESUMO

**Everton de Souza Ribeiro**  
[evertonribeiro@alunos.utfpr.edu.br](mailto:evertonribeiro@alunos.utfpr.edu.br)  
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Londrina, Paraná, Brasil

**Rodrigo Corrêa da Silva**  
[rodrigossilva@utfpr.edu.br](mailto:rodrigossilva@utfpr.edu.br)  
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Londrina, Paraná, Brasil

**Ismael de Marchi Neto**  
[ismaelneto@utfpr.edu.br](mailto:ismaelneto@utfpr.edu.br)  
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Londrina, Paraná, Brasil

**Rafael Sene de Lima**  
[rafaellima@utfpr.edu.br](mailto:rafaellima@utfpr.edu.br)  
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Londrina, Paraná, Brasil

**Ricardo de Vasconcelos Salvo**  
[ricardosalvo@utfpr.edu.br](mailto:ricardosalvo@utfpr.edu.br)  
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Londrina, Paraná, Brasil

A gaseificação é uma das opções para conversão de biomassa em combustível gasoso para geração de calor e energia em plantas de pequena escala. O presente estudo avalia a gaseificação de madeira de eucalipto com base em simulações computacionais utilizando equilíbrio químico termodinâmico. O *software open source Chemical Equilibrium with Applications* (CEA), desenvolvido pela NASA, é aplicado neste trabalho. Parâmetros operacionais favoráveis são identificados avaliando a composição do gás de síntese em termos de CH<sub>4</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, N<sub>2</sub> e carbono não-convertido. Além disso, a eficiência de conversão, conversão de carbono e poder calorífico são avaliados. Temperaturas de gaseificação entre 400-1000 °C e razões de equivalência entre 1,0 e 8,75 são avaliadas usando ar como agente gaseificador, enquanto a pressão é mantida constante a 100 kPa. Concentrações significativas de CO e H<sub>2</sub> no gás de síntese são alcançados em temperaturas acima de 550 °C, resultados compatíveis com as reações de gaseificação homogêneas e heterogêneas, ou seja, Boudouard, reação da água e conversão por vapor. Valores ótimos de eficiência de conversão e conversão de carbono são identificados em termos de temperatura e razão de equivalência. A presença de carbono não convertido foi um fator crucial para identificar a piora na qualidade do gás de síntese e, conseqüentemente, o valor de poder calorífico.

**PALAVRAS-CHAVE:** Gaseificação. Madeira de eucalipto. Equilíbrio químico termodinâmico.

**Recebido:** 19 ago. 2019.

**Aprovado:** 01 out. 2019.

**Direito autoral:** Este trabalho está licenciado sob os termos da Licença Creative Commons-Atribuição 4.0 Internacional.



### ABSTRACT

*Gasification is one of the options for conversion of biomass into gaseous fuel for both heat and power generation in distributed plants. The present study evaluates the gasification of eucalyptus wood based on computational simulations using a thermodynamic equilibrium model. The open-source program Chemical Equilibrium with Applications (CEA) developed by NASA is applied in this work. Favorable operating parameters are identified by evaluating the syngas composition in terms of CH<sub>4</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, N<sub>2</sub>, and unconverted carbon. In addition, cold gas efficiency, carbon conversion, and heating value are evaluated. Gasification temperatures between 400-1000 °C and equivalence ratios between 1.0 and 8.75 are evaluated by using air as gasifying agent, while pressure is kept constant at 100 kPa. Significant values of CO and H<sub>2</sub> concentration in the syngas are reached at temperatures above 550 °C which is agreement with the occurrence of homogenous and heterogeneous gasification reactions, i.e., Boudouard, water-shift and steam reforming reactions. Optimum values of cold gas efficiency and carbon conversion are identified in terms of gasification temperature and equivalence ratio. In turn, presence of unconverted carbon is identified as a crucial factor for reducing the quality of syngas and consequently the heating value.*

**KEYWORDS:** Gasification. Eucalyptus wood. Thermodynamic chemical equilibrium.

## INTRODUÇÃO

A energia da biomassa tem sido amplamente explorada em todo o mundo devido a seus custos reduzidos, disponibilidade e aspectos ambientais. Uma das opções para conversão da biomassa em energia em pequena escala é a gaseificação. Consiste de um processo termoquímico em que hidrocarbonetos são convertidos em um gás de síntese, rico em  $H_2$  e  $CO$ , além de outros componentes como  $CO_2$ ,  $CH_4$ ,  $N_2$  e outras espécies não combustíveis. O gás de síntese pode ser aplicado para gerar energia elétrica em motores de combustão interna ou calor dentro de fornos.

A produção de gás de síntese a partir de combustíveis sólidos requer pelo menos três etapas básicas: secagem, pirólise (redução) e gaseificação. As reações ocorrem normalmente dentro de um gaseificador que pode ser equipado com uma grelha fixa ou leito fluidizado. Os gaseificadores são geralmente classificados em cocorrente e contracorrente. Em gaseificadores cocorrente, a entrada de biomassa e a saída de gás de síntese são posicionadas no topo, enquanto o suprimento de ar ocorre pelo fundo, resultando em uma zona de combustão próxima à grelha. A principal dificuldade neste gaseificador é o alto teor de alcatrão no gás de síntese, exigindo mais etapas de purificação antes da sua conversão em energia térmica. Os gaseificadores contracorrente lidam esse problema injetando ar acima da zona de oxidação enquanto a saída do gás de síntese é posicionada na parte inferior. Neste arranjo, os produtos de combustão são forçados a passar por uma zona de redução antes da grelha, promovendo uma conversão precoce do alcatrão. As principais desvantagens são a faixa reduzida de matéria-prima que podem ser utilizadas e a menor eficiência térmica em comparação com o gaseificador cocorrente Quadros (2013).

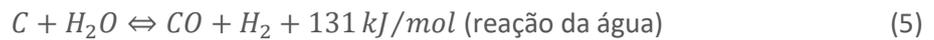
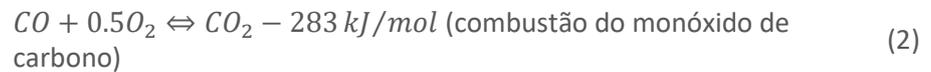
O teor de alcatrão é certamente um dos principais limitantes no processo de gaseificação; é um hidrocarboneto complexo com poder calorífico elevado, formado principalmente a baixas temperaturas e em regiões ricas em combustível. A condensação do alcatrão ocorre em baixas temperaturas, levando ao bloqueio e entupimento de tubulações e outros equipamentos, tais como filtros, motores a combustão, turbinas e queimadores. As técnicas para redução do alcatrão são divididas em métodos primários e secundários. A primeira abordagem consiste de tratamentos dentro do gaseificador, convertendo o alcatrão em espécies gasosas não voláteis, como  $CO$ ,  $CO_2$  e  $H_2$ . A reação é endotérmica e requer zonas de alta temperatura como nos gaseificadores contracorrente. Os métodos secundários são tratamentos a jusante do gaseificador e consistem em filtros, ciclones e métodos catalíticos.

A modelagem numérica do processo de gaseificação é amplamente utilizada para fornecer condições operacionais teóricas favoráveis ao gaseificador, procurando reduzir a formação de alcatrão. A modelagem da gaseificação pode ser realizada utilizando cinética e equilíbrio químico. A cinética química é capaz de prever o comportamento da gaseificação usando dados de cinética química obtidos experimentalmente; é a abordagem mais recomendada para comparação entre tecnologias de gaseificação. Os cálculos de equilíbrio preveem o limite termodinâmico da reação de gaseificação, sendo mais indicado para avaliar a influência de parâmetros operacionais, por exemplo, temperatura, razão de equivalência, excesso de oxigênio, entre outros. Segundo Rodrigues et al. (2016), a abordagem de equilíbrio químico mostrou boa concordância com dados experimentais em gaseificadores de leito fixo a altas temperaturas, exceto em gaseificadores cocorrente, requerendo modelos mais detalhados.

Para entender o impacto dos parâmetros operacionais na gaseificação de madeira de eucalipto em um gaseificador de 174 kW<sub>th</sub>, foram realizadas simulações baseadas em equilíbrio químico. As simulações foram realizadas com o auxílio do programa de código aberto CEA (*Chemical Equilibrium with Applications*), distribuído pela NASA (*National Aeronautics and Space Administration*). Foram obtidos dados numéricos de formação de espécies químicas, eficiência de gás frio, conversão de carbono e poder calorífico em função da temperatura e razão de equivalência.

### METODOLOGIA

As principais reações químicas que ocorrem durante o processo de gaseificação são mostradas nas equações (2) a (8), de acordo com Shayan et al. (2018):



A razão de equivalência, dado pela equação (8), é um parâmetro operacional importante durante a gaseificação sendo definido como a relação de massa de ar e combustível pela razão de massa de ar e combustível em condições estequiométricas.

$$\phi = \frac{\frac{m_{air}}{m_{fuel}}}{\left(\frac{m_{air}}{m_{fuel}}\right)_{stoichiometric}} \quad (8)$$

A eficiência de gás frio (CGE em inglês) determina a eficiência da gaseificação, definido pela razão entre o poder calorífico da biomassa e do gás de síntese, dado pela equação seguinte, conforme Rodrigues et al. (2016):

$$CGE = \frac{\frac{m_{syngas}}{MW_{syngas}}}{m_{biomass} \cdot HHV_{biomass}} \sum_{i=1}^N y_i HHV_i VM_i \quad (9)$$

onde  $m_{syngas}$  e  $m_{biomass}$  são a massa de gás de síntese e biomassa, respectivamente,  $MW_{syngas}$  é o peso molar de gás de síntese,  $y_i$ ,  $HHV_i$  e  $VM_i$  é a concentração molar, poder calorífico superior e volume molar da espécie  $i$ ;  $HHV_{biomass}$  poder calorífico superior da biomassa.

A conversão de carbono (CC), calculada pela equação (10), mensura a conversão do carbono da biomassa em espécies gasosas permanentes (como CO, CO<sub>2</sub> e hidrocarbonetos). Valores de CC abaixo de 100% significam a presença de alcatrão e outros compostos indesejáveis no gás de síntese.

$$CC = \frac{m_{syngas}}{MW_{syngas}} \frac{24.79}{m_{biomass}} \frac{12(CO + CO_2 + CH_4 + 2C_2H_4 + 2C_2H_6)_{kmol,syngas}}{24.79C_{kg,biomass}} \quad (10)$$

Uma composição típica de madeira de eucalipto, incluindo o poder calorífico superior (PCS) e o inferior (PCI) é apresentada na Tabela 1.

Tabela 1 - Composição da madeira de eucalipto.

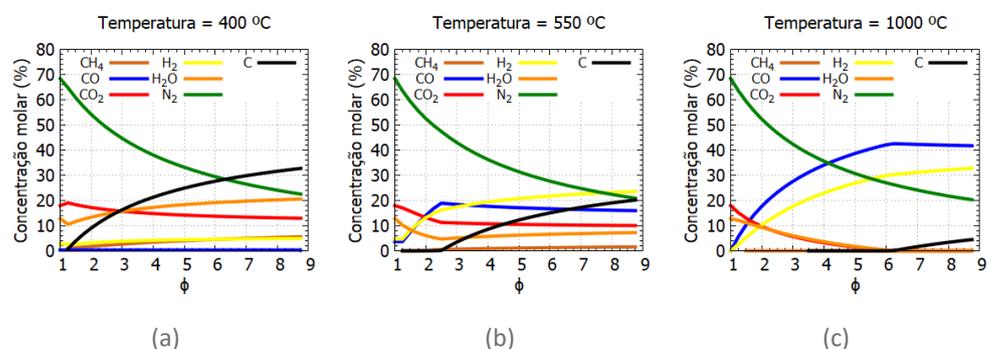
Espécies	Análise elementar (daf %)	Massa molar (kg/kmol)	Mols
C	49.420	12	41.183
H	5.920	1	59.203
O	44.347	16	27.717
N	0.303	14	0.216
S	0.010	32	0.003
PCI (MJ/kg)		18.27	
PCS (MJ/kg)		19.42	

Fonte: Cortez et al. (2008).

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

A Figura 1 mostra a formação dos produtos de gaseificação em função da razão de equivalência em temperaturas entre 400 °C e 1000 °C. Em condições estequiométricas (razão de equivalência igual a 1), a formação de CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O ocorre em toda faixa de temperatura devido às reações de oxidação. Aumentando a razão de equivalência encoraja a formação de CO, H<sub>2</sub> e outras espécies menores em todas as faixas de temperatura. Isso ocorre devido à ausência de oxigênio (O<sub>2</sub>) nas reações, deslocando o equilíbrio químico para espécies parcialmente oxidadas. A medida que a temperatura aumenta, a formação de CO e H<sub>2</sub> aumenta paralelamente a uma diminuição da concentração de CH<sub>4</sub> e CO<sub>2</sub>. Reações endotérmicas, incluindo Boudouard, reação da água e reforma por vapor, explicam esse comportamento.

Figura 1 – Produtos da gaseificação para diferentes temperaturas em função da razão de equivalência.



Fonte: Autoria própria (2019).

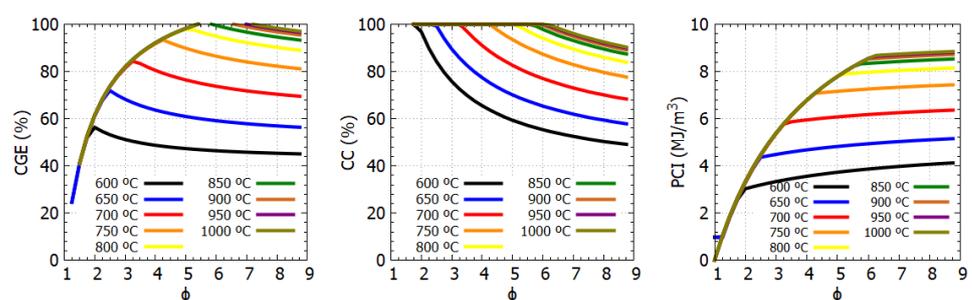
A temperaturas inferiores a 550 °C não são observadas diferenças significativas entre os resultados, devido a energia térmica insuficiente para ativar as reações. A limitação da modelagem utilizando equilíbrio químico em temperaturas baixas é reportado por Rodrigues et al. (2016). O pico de

concentração de CO (quase 20%) ocorre a razões de equivalência entre 2,50 e 2,75 e 550 °C. Vale notar que a concentração de CO é insignificante (menos de 5%) em temperaturas abaixo de 550 °C, enquanto a presença de carbono não convertido (C) é observada para toda a faixa de razão de equivalência.

À medida que a temperatura aumenta, a presença de carbono não convertido se altera para valores mais altos de razão de equivalência, enquanto a formação de CO é reduzida. A 550 °C, o carbono não convertido é observado a razões de equivalência em torno de 2,5, enquanto em temperaturas entre 900-1050 °C ocorre em valores superiores a 6,0. Embora existam condições específicas para a formação de CO, a conversão de hidrocarbonetos e água em hidrogênio ocorre quase em todas as faixas de temperatura e razão de equivalência. Uma presença mais intensa de H<sub>2</sub> ocorre a temperaturas superiores a 550 °C como consequência de reações endotérmicas; um efeito semelhante também é observado para o CO.

A Figura 2 (a) mostra a eficiência de gás frio (CGE) em função da temperatura e da razão de equivalência. Em cada temperatura existe uma razão de equivalência que maximiza a CGE, devido à ausência de carbono não convertido ou espécies totalmente oxidadas, isto é, CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O. No geral, altos valores de razão de equivalência tornam-se necessários para maximizar o CGE à medida que a temperatura aumenta. Como mostrado na Fig. 5 (a), a 600 °C um CGE máximo de cerca de 57% foi alcançado em uma razão de equivalência próxima de 2,0, enquanto a 800 °C um CGE máximo de aproximadamente 97% foi obtido em um valor de razão de equivalência em torno de 5,0. Um CGE de 100% é alcançado apenas em temperaturas superiores a 800 °C. A Figura 5 (b) mostra a conversão de carbono (CC) em função da temperatura e razão de equivalência. O gráfico indica claramente os parâmetros operacionais que são mais favoráveis à presença de carbono não convertido. Por exemplo, a presença de carbono não convertido a 600 °C ocorre em razões de equivalência próximas a 2,0, enquanto a 800 °C de carbono não convertido é observado na razão de equivalência maior que 5,0.

Figura 2 – CGE, CC e PCI para diferentes temperaturas.



Fonte: Autoria própria (2019).

A Figura 3 mostra os valores de poder calorífico inferior (PCI) em função da temperatura e razão de equivalência. No geral, uma inclinação mais acentuada na curva de poder calorífico é notada até um certo valor de razão de equivalência, seguido pela atenuação da inclinação, onde a curva se torna quase plana. A inclinação é mais significativa quando o CO e o H<sub>2</sub> são formados simultaneamente e há ausência de carbono não convertido. Por outro lado, a inclinação é menos significativa na presença de carbono não convertido, embora a conversão de H<sub>2</sub> ainda ocorra conforme indicado na Fig. 3.

## CONCLUSÃO

O presente trabalho avaliou o comportamento teórico da gaseificação da madeira de eucalipto com base em cálculos de equilíbrio químico. A análise empregou o software de código aberto *Chemical Equilibrium with Applications* (CEA), em inglês, desenvolvido pela NASA. As simulações foram realizadas aplicando ar como agente gaseificador, temperaturas de operação entre 400 °C e 1000 °C a 100 kPa. As principais conclusões são resumidas da seguinte a seguir:

- i. Em temperaturas abaixo de 550 °C, os resultados são semelhantes e não são observados desvios significativos entre os resultados, principalmente devido à energia térmica insuficiente e uma presença de carbono não convertido mais proeminente;
- ii. Valores significativos de CO e H<sub>2</sub> (maior que 15%) no gás de síntese são obtidos em temperaturas acima de 550 °C, como consequência das reações de endotérmicas.
- iii. Valores altos de razão de equivalência são necessários para maximizar a eficiência do gás frio à medida que a temperatura aumenta;
- iv. A eficiência de gás frio de 100% é alcançada em temperaturas superiores a 800 °C e razões de equivalência superiores a 5,5;
- v. Carbono não convertido e concentração de espécies totalmente oxidadas reduzem drasticamente a eficiência do gás frio;
- vi. Os gráficos de conversão de carbono indicam condições operacionais não favoráveis em função da razão de equivalência e temperatura;
- vii. Os valores de poder calorífico variam em função da temperatura e da razão de equivalência. O poder calorífico inferior máximo obtido foi de 9,5 MJ/m<sup>3</sup> e é alcançado a 900 °C e a razão de equivalência 6,25.

### AGRADECIMENTOS

A Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR) pela bolsa concedida e aos professores do Laboratório de Sistemas Térmicos (TSL) e Laboratório de Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional.

### REFERÊNCIAS

- CORTEZ, L. A. B.; GÓMEZ, E. O.; LORA, E. E. S. **Biomassa para energia**. Unicamp, 2008.
- QUADROS, A. **Desempenho de uma unidade autônoma de geração de energia elétrica composta por um gaseificador e grupo gerador e estado do motor após alimentação com gás de síntese**, 2013. Trabalho de conclusão de curso (Mestrado em engenharia de edificações e saneamento), Londrina: Universidade Estadual de Londrina (UEL). Acesso em: 3/1/2018.
- RODRIGUES, R.; MUNIZ, A. R.; MARCILIO, N. R.; et al. EVALUATION OF BIOMASS AND COAL CO-GASIFICATION OF BRAZILIAN FEEDSTOCK USING A CHEMICAL EQUILIBRIUM MODEL. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, v. 33, n. 2, p. 401–414, 2016.
- SHAYAN, E.; ZARE, V.; MIRZAEI, I. Hydrogen production from biomass gasification; a theoretical comparison of using different gasification agents. **Energy Conversion and Management**, v. 159, p. 30–41, 2018.