



## COMBUSTÃO DE CARVÃO PULVERIZADO: UMA ANÁLISE NUMÉRICA DOS PARÂMETROS PRINCIPAIS

### Valdeci José Costa

UNIPLAC - Universidade do Planalto Catarinense, Departamento de Ciências Exatas e Tecnológicas, Lages, SC, Brasil, CP 525, CEP 88.509-900

E-mail: [valdeci@uniplac.rct-sc.br](mailto:valdeci@uniplac.rct-sc.br)

### Viktor Krioukov

UNIJUÍ - Universidade Regional do do Estado do Rio Grande do Sul, Programa de Pós Graduação em Modelagem Matemática, CP 560, CEP 98.700-000 Ijuí - RS - Brasil

E-mail: [kriukov@main.unijui.tche.br](mailto:kriukov@main.unijui.tche.br)

### Clóvis Raimundo Maliska

UFSC - Universidade Federal de Santa Catarina. Departamento de Engenharia Mecânica Florianópolis, SC, Brasil, CP 476, CEP 88.040

E-mail: [maliska@sinmec.ufsc.br](mailto:maliska@sinmec.ufsc.br)

**Resumo.** Neste trabalho propõe-se um modelo matemático destinado à combustão de carvão pulverizado em um escoamento reagente. O modelo é composto por equações da cinética química na forma exponencial, equações concomitantes e de troca de massa. Leva-se em conta a composição da partícula, a devolatilização e a transformação de CO e CO<sub>2</sub> como função da temperatura. As pesquisas numéricas indicam: maior rapidez de consumo para os voláteis em relação ao carbono; brusca passagem da formação de CO<sub>2</sub> para formação exclusiva de CO; altas taxas de concentração de NO e CO ao final do processo; a temperatura inicial do gás é fundamental para que haja ignição e altas taxas de combustão; que o coeficiente de excesso de oxidante é um dos fatores determinantes na taxa de combustão.

**Palavras chave:** Análise numérica, Parâmetros, Produtos de combustão.

## 1. INTRODUÇÃO

Desde há muito tempo que o homem preocupa-se com a exploração e utilização de seus recursos energéticos, especialmente no que se refere ao consumo per capita (Theis, 1996) e as sanções ambientais impostas. Face a estes e outros fatos, e em sendo o carvão uma das principais fontes energéticas das próximas décadas é que propomos este trabalho na área de combustão de carvão pulverizado.

Atualmente inúmeros pesquisadores dedicam-se ao estudo e compreensão de métodos eficientes de combustão do carvão. Porém, existem várias dificuldades, devido a

complexidade do processo propriamente dito; da composição do combustível: voláteis, resíduos, carbono puro, etc.; decomposição dos voláteis no início da combustão; ao aquecimento da partícula não ser uniforme, além de outros. Durante a combustão, imaginamos que o carvão seja composto por partículas, na superfície das quais realiza-se a combustão do carvão, podendo formar  $CO$  e  $CO_2$  como função da temperatura na superfície da partícula. O calor oriundo da combustão difunde-se por convecção e por radiação entre partículas e o meio gasoso. Visando maior elucidação, a Fig.1 apresenta um esquema da partícula de carvão em condições de combustão.

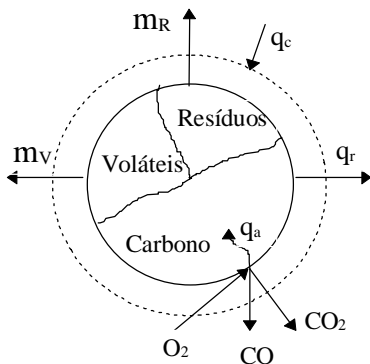


Figura 1 – Partícula de carvão.

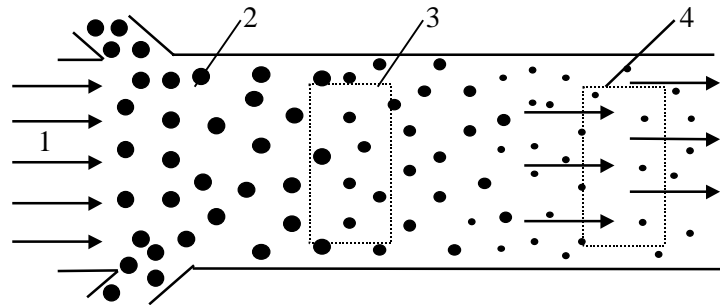


Figura 2 – Esquema de combustão em fluxo reagente.

No início do processo, imaginamos o fluxo composto apenas por oxidante, para daí então receber pequenas partículas, as quais podem ter vários tamanhos (veja Fig.2). Por ser abundante, o oxidante (já a uma temperatura elevada) difunde-se pela superfície das partículas, produzindo  $CO$  e  $CO_2$ . Enquanto isso, aceleram-se as reações químicas do fluxo, em primeiro lugar por causa dos voláteis emitidos pelas partículas e depois pelos demais produtos de combustão, o que proporciona aumento de temperatura e velocidade das reações químicas. Nesta etapa as variações de pressão não são significativas, o que, provoca aumento na velocidade do fluxo e conseqüente aumento no consumo.

## 2. ESQUEMA FÍSICO E ADMISSÕES DO MODELO

O esquema físico elaborado considera os seguintes fenômenos: reações químicas no meio gasoso, no nível da cinética química formal e sua influência mútua na temperatura do gás ( $T_g$ ); alteração da temperatura do fluxo e sua velocidade; velocidades diferentes de devolatilização e queima do carbono; aquecimento das partículas durante o processo de combustão; influência da concentração de oxidante na velocidade de combustão da partícula; partícula contendo substâncias voláteis, inertes e carbono; a emissão de matéria volátil dependendo da temperatura da partícula ( $T_p$ ); a transmissão de calor entre partículas e gás ocorrendo por condutividade térmica e por radiação; As hipóteses simplificadoras são: o gás e as partículas possuem a mesma velocidade ( $W$ ) e o fluxo é unidimensional; as partículas possuem forma esférica e todas com o mesmo diâmetro ( $d_p$ ); a condutividade térmica dentro da partícula é infinitamente grande; não há interação entre partículas; o consumo de resíduos será considerado proporcional ao consumo de carbono e pressão ( $P$ ) constante.

## 3. MODELO MATEMÁTICO

O modelo matemático constitui-se das seguinte equações:

1. Equações da composição gasosa na forma exponencial:

Estas equações na sua forma geral são apresentadas por (Krioukov, 1995) como:

$$\frac{d\gamma_i}{dx} = \frac{1}{W} \left( -e^{\gamma_i} \sum_j v_{ij} \Omega_j + \sum_q \sum_j v_{ij} \Omega_j \right) \quad (1)$$

Onde:  $\sum_i r_i = \sum_i e^{-\gamma_i} = 1$  (2)

$$\Omega_j = k_j \left( \frac{P}{RT_g} \right)^{\bar{m}_j} \exp \left( - \sum_q n_{qj} \gamma_q \right) \quad j=1 \dots (2m+r);$$

$$\gamma_i = -\ln r_i; \quad \bar{m}_j = m_j - 1 + \sum_q n_{qj}; \quad i, q = 1, \dots, n;$$

$m_j$  - índice de participação da partícula catalítica  $M$  na reação  $j$  ( $m_j=1$  ou  $m_j=0$ );

$R$  - constante universal de gás na sistema de unidades para a cinética química ( $R=1,987$ );

$r_i$  - frações molares do meio gasoso;

Pela eq.(1) as reações diretas têm os números  $j = 1, \dots, m$ ; as reações inversas:  $j = (m+1), \dots, 2m$  e as reações de troca de massa  $j = (2m+1), \dots, (2m+r)$ .

2. Equação do consumo relativo de matéria volátil (Kobayashi et al., 1976):

$$\frac{d\bar{G}_V}{dx} = -\frac{\bar{G}_V}{W} (0,4K_1 + 0,8K_2) \equiv f_V; \quad (3)$$

Onde:  $x$  - coordenada corrente ao longo de canal;  $t$  - tempo;

parâmetros cinéticos  $K_1 = B_1 \exp(-E_1 / R_o T_p)$ ,  $K_2 = B_2 \exp(-E_2 / R_o T_p)$ ;  $B_1, B_2, E_1, E_2$ ;

$R_o$  - constante universal de gás no sistema SI;  $G_p = m_p N_p W$ ;  $N_p W = f_p = const.$ ;

$m_p$  - massa da partícula.

Consumo total ( $G_\Sigma$ ) por unidade da área: carvão ( $G_p$ ) + meio gasoso ( $G_g$ );

$$G_\Sigma = (G_p + G_g) = const. \quad \bar{G}_V = \frac{f_p m_V}{G_\Sigma}; \quad \bar{G}_C = \frac{f_p m_C}{G_\Sigma}; \quad \bar{G}_R = \frac{f_p m_R}{G_\Sigma};$$

$W$  é a velocidade; e os índices  $V, R, C, p$  e  $g$  referem-se respectivamente a voláteis, resíduos, carbono, partícula e gás.

3. Equação do consumo (queima) de carbono (Baseada na equação de oxidação do carbono na superfície externa do carvão: Monson et al., 1996):

$$\frac{d\bar{G}_C}{dx} = -\frac{4,836}{W} P_{O_2}^{0,5} A_k \left[ \exp \left( \frac{-E_k}{R_o T_p} \right) \right] \cdot \left( \frac{f_p}{G_\Sigma} \right)^{\frac{1}{3}} \times \left( \frac{\bar{G}_C}{\rho_C} \right) / \left( \sum_s \frac{\bar{G}_s}{\rho_s} \right) \equiv f_C; \quad (4)$$

Onde:  $P_{O_2}$  é a pressão parcial do oxigênio;  $A_k$  e  $E_k$  são parâmetros cinéticos;

4. Equação do consumo de resíduos.

$$\frac{d\bar{G}_R}{dx} = f_C \frac{\bar{G}_R}{G_C} \frac{\rho_C}{\rho_R} \equiv f_R \quad (5)$$

5. Equação da temperatura da partícula (Baseada na equação de Tang e Ohtake, 1988):

$$\frac{dT_p}{dx} = \frac{4,836 \left( \frac{f_p}{G_\Sigma} \right)^{\frac{1}{3}} \left( \sum_s \frac{\bar{G}_s}{\rho_s} \right)^{\frac{2}{3}} \left[ \bar{h}(T_g - T_p) - \sigma \varepsilon (T_p^4 - T_k^4) \right] + f_V L_V - f_C \left[ (1-\varphi) \frac{\Delta H_{CO}^+}{\mu_C} + \varphi \frac{\Delta H_{CO_2}^+}{\mu_C} \right]}{C_\Sigma (\bar{G}_V + \bar{G}_C + \bar{G}_R)} \equiv f_{T_p} \quad (6)$$

onde :  $C_\Sigma = \frac{\sum_s \bar{G}_s \cdot C_s}{\sum_s \bar{G}_s}$  é o calor específico médio da partícula;  $C_s$  - calor específico da s-ésima

fração da partícula;  $\bar{h}$  - coeficiente médio de transmissão de calor por convecção;  $\sigma$  - constante de Stefan - Boltzmann;  $\varepsilon$  - emissividade;  $L_V$  - calor latente de vaporização dos voláteis;  $T_k$  - temperatura das paredes;  $\mu_C$  - massa molecular do carbono;  $\Delta H_{CO}^+, \Delta H_{CO_2}^+$  - calores de formação das substâncias  $CO$  e  $CO_2$ .

6. Equação calorífica (Krioukov, 1995), relaciona a temperatura, composição e entalpia do gás ( $H_g$ ):

$$F_T \equiv T_g - T^{ap} - \frac{\sum (H_g \mu_i - H_i^{ap}) r_i}{\sum C_{pi} r_i} = 0 \quad (7)$$

onde :  $H_i^{ap}$ ,  $C_{pi}$  e  $\mu_i$  são a entalpia de "apoio", calor específico e massa molecular da i-ésima substância gasosa.

7. Equação da conservação de massa para toda a mistura:

$$F_W \equiv \sum_s \bar{G}_s + \frac{P \mu_g}{R_o T_g} \frac{W}{G_\Sigma} - \frac{P \mu_g}{R_o T_g} \cdot \sum_s \frac{\bar{G}_s}{\rho_s} - 1 = 0; \quad (8)$$

8. Equação da energia para todo o fluxo:

$$F_H \equiv \sum_s H_s \bar{G}_s + \frac{H_g P \mu_g W}{R_o T_g G_\Sigma} - \frac{H_g P \mu_g}{R_o T_g} \sum_s \frac{\bar{G}_s}{\rho_s} - \frac{H_\Sigma}{G_\Sigma} = 0 \quad (9)$$

onde :  $H_s$  - entalpia de s-ésima fração do carvão e  $H_\Sigma$  é a entalpia inicial de toda a mistura.

9. Equação da razão de formação de  $CO$  e  $CO_2$  na superfície da partícula.

$$F_\varphi \equiv \frac{1-\varphi}{\varphi} - A_\varphi \exp(-E_\varphi / R_o T_p) = 0 \quad (10)$$

onde  $\varphi$  determina a transformação do "char" em  $CO$  e  $CO_2$  na superfície da partícula como função da temperatura e é refletida pela reação heterogênea (Veras et al., 1996):



Como resultado do modelo matemático temos (n + 8) equações algébrico-diferenciais com o mesmo número de incógnitas:  $\gamma_i, \bar{G}_V, \bar{G}_C, \bar{G}_R, T_p, T_g, W, H_g, \varphi$ .

O modelo estará assim, completo e invariante em relação a composição, quando utilizamos as reações de troca de massa e suas respectivas constantes de velocidade propostas por (Krioukov e Costa, 1998).

#### 4. ALGORITMO DE RESOLUÇÃO

Na descrição da aplicação do método admite-se que o sistema seja:

$$\frac{dx_i}{dt} = f(<x_k>); \quad i = 1..n, \quad k = 1, \dots, q$$

$$F_i(<x_k>) = 0 \quad i = n+1, \dots, q; \quad (12)$$

com dados iniciais:  $x_i(t=0) = x_i^o$ , onde:  $<x_k> \equiv x_1, x_2, \dots, x_q$ .

De acordo com o esquema de Pirumov (Pirumov e Kamsolov, 1966), as equações diferenciais do sistema (12) no n-ésimo passo de integração tornam-se:

$$F_i^{n+1} \equiv x_i^{n+1} - x_i^n - h(Sf_i(<x_k^n>) + (1-S)f_i(<x_k^{n+1}>)) = 0 \quad (13)$$

onde:  $x_i^n$  e  $x_i^{n+1}$  são os valores de  $x_i$  no início e no fim do passo “h”;  $S$  é o parâmetro de aproximação ( $S=0,4$ ). Como as equações (13) são algébricas não lineares com incógnitas  $x_i^{n+1}$  para resolvê-las utiliza-se o método de Newton:

$$x_i^{n+1,m+1} = x_i^{n+1,m} - \Delta x_i^{n+1,m}; \quad i, k = 1, \dots, q; \quad (14)$$

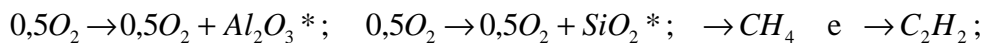
onde  $\Delta x_i^{n+1,m}$  será determinado por:

$$\left[ \frac{\partial F_i}{\partial x_k} \right] \Delta x_i^{n+1,m} = F_k^m; \quad (15)$$

#### 5. PESQUISAS NUMÉRICAS

Com base no algoritmo foi desenvolvido o aplicativo e foram realizadas pesquisas numéricas. O oxidante é o ar (com fórmula condicional  $N_{78}O_{22}$ ). O combustível é o carvão do tipo linhito, composto por 20% de matéria volátil, 70% de carbono fixo e 10% de resíduos. Propõe-se que a matéria volátil seja composta por:  $CH_4$  (metano)=70% e  $C_2H_2$  (Acetileno)=30% e os resíduos formados por:  $Al_2O_3^*$  = 60% e  $SiO_2^*$  = 40%.

Na fase gasosa, inclui-se no meio reagente as substâncias:  $N, N_2, NO, NO_2, NH, NH_2, NH_3, HNO, H_2O_2, N_2O, H, H_2, O, O_2, C, CO, H_2O, OH, CH_4, CH_2, CH_3, HCO, H_2CO, C_2H, HO_2, C_2H_6, C_2H_5, C_2H_3, C_2H_4, C_2H_2, CO_2, Al, Si, Al_2O_3^*, SiO_2^*$  (\* - índice de substância condensada) e o mecanismo das transformações inclui 128 reações. O mecanismo foi escolhido baseando-se nos trabalhos Westbrook et al. (1984) e Aravin et al. (1982). Entre as reações foram incluídas as reações de combustão do carbono na superfície da partícula, as de liberação de resíduos e de devolatilização:



Como regime básico foram escolhidos parâmetros com os respectivos valores:

$$G_{comb} = 0,01 \text{ Kg} / \text{s}; \quad \alpha_{ox} = 1,2; \quad d_p = 100 \mu\text{m}; \quad T_g^0 = 1200 \text{ K}; \quad T_p^0 = 300 \text{ K}.$$

Entenda-se aqui regime básico como a simulação que servirá de padrão para efeito de comparação com as demais simulações uma vez que este trabalho tem conotação qualitativa.

### 5.2 Influência da pressão no processo de combustão

Tendo como ponto de partida o regime básico, foram realizadas simulações variando-se a pressão dentro do canal para valores de 1, 2, 3, 5 e 10 atm. A Fig.3 ilustra o “tempo” de queima para carbono, voláteis e a variação de  $\phi$  para 1 atm e 5 atm. Observando-a vemos que com o aumento da pressão a velocidade das reações químicas é mais intensa, com isto a queima ocorre mais rapidamente, isto porque, como aumenta a pressão, aumenta  $P_{O_2}$  e portanto a velocidade de consumo de carbono na superfície é maior.

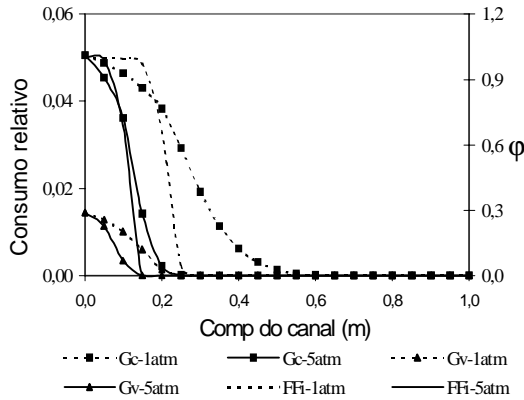


Figura 3 – Comparação do período de queima entre regimes de 1atm e 5atm, e, variação da função  $\phi = FFi$

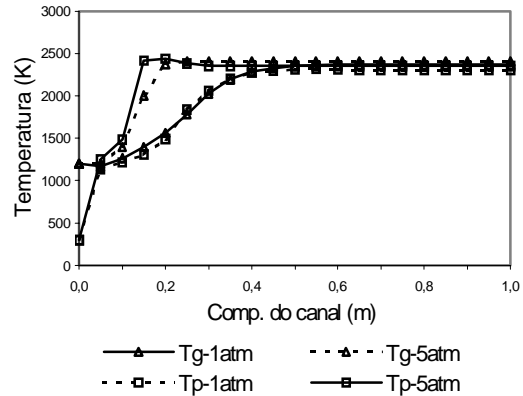


Figura 4 - Variação da temperatura do gás e da partícula para 1atm e 5atm

A Fig.4 permite-nos comparar a evolução das temperaturas do gás e partículas para 1atm e 5atm. Nela vemos que  $T_g$  para 5atm é maior do que a  $T_g$  para 1atm, quase 60K. Já durante o aquecimento das partículas para 5atm a diferença de temperatura entre gás e partículas chega a 120°C. Isto deve-se a aceleração das reações químicas que intensificam a combustão e a partícula se aquece mais. A explicação deste fato baseia-se no Princípio de *Le Chatelier*.

Este fato também pode ser constatado observando a Fig.5, na qual podemos ver que a concentração de CO no equilíbrio químico para 1atm é maior que para 5atm. Já a concentração de NO é um pouco maior para 5atm.

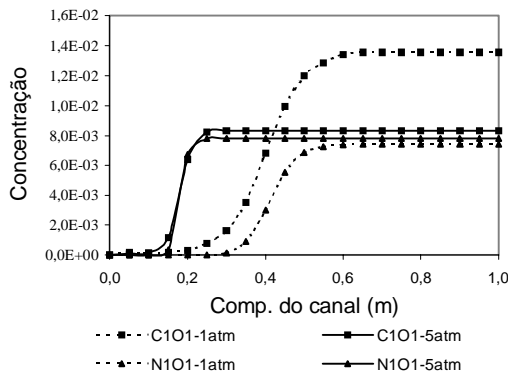


Figura 5 - Comparação entre a formação de CO e NO para 1atm e 5atm

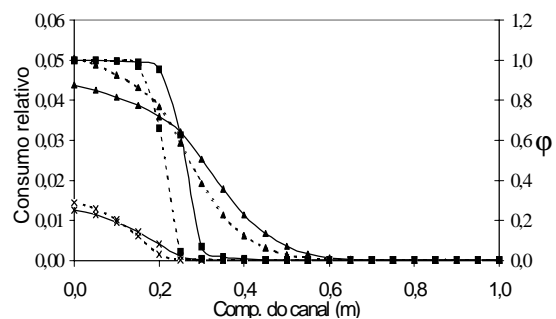


Figura 6- Comparação do consumo relativo e da função  $\phi$  para  $\alpha_{ox}=1,2$  e  $\alpha_{ox}=1,4$

### 5.3 Influência de $\alpha_{ox}$ :

Nesta etapa foram feitas simulações variando-se o coeficiente de excesso de oxidante  $\alpha_{ox}$ , isto é, foi mantido o mesmo consumo de combustível, mas foi alterado o consumo de oxidante (ar). Isto implica numa maior concentração de algumas substâncias. A Fig.6 compara o “tempo” de queima para  $\alpha_{ox}=1,4$  e  $\alpha_{ox}=1,2$ . Depois de observá-la podemos salientar que como temos maior fluxo de ar, a velocidade é um pouco maior, conseqüentemente o tempo de queima é maior. A função  $\varphi$  é retardada mas reduz-se de 1 à 0 na mesma variação de espaço. Note-se que as frações mássicas de carbono e voláteis são inicialmente menores se comparadas ao regime básico; a explicação vem do fato do aumento de matéria no fluxo.

A Fig.7 ilustra o comportamento de  $T_g$ ,  $T_p$  e  $W$  para  $\alpha_{ox}=1,4$  e  $\alpha_{ox}=1,2$ . Como já se sabe, a distância de combustão é determinada por  $W$ ,  $T$  e  $r_{O_2}$  para uma mesma pressão.

Notemos que pela Fig.7 que ocorrem pequenas variações finais nas temperaturas, com tendências a diminuir para  $\alpha_{ox}$  maiores que estes. Podemos notar que os mesmos padrões

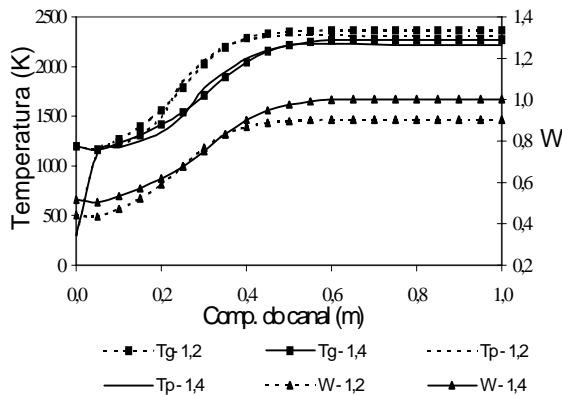


Figura 7 – Evolução da velocidade e temperaturas da partícula e do gás para  $\alpha_{ox}=1,2$  e  $\alpha_{ox}=1,4$

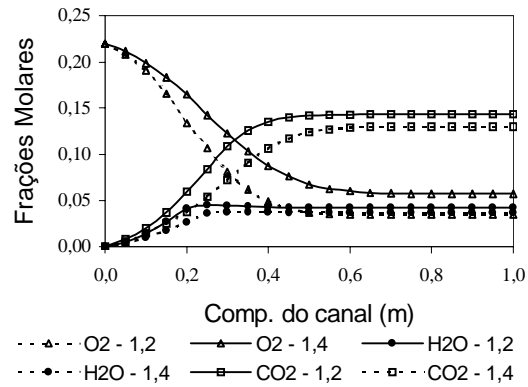


Figura 8 - Formação de  $O_2$ ,  $H_2O$  e  $CO_2$  para  $\alpha_{ox}=1,2$  e  $\alpha_{ox}=1,4$ :

de evolução de temperatura e velocidade ocorrem para esta simulação. A Fig.8 compara a variação na concentração de  $O_2$ ,  $H_2O$  e  $CO_2$  para  $\alpha=1,4$  e  $\alpha=1,2$ . Como podemos ver no equilíbrio temos mais  $O_2$  para  $\alpha_{ox} = 1,4$ ; já as concentrações de  $H_2O$  e  $CO_2$  são reduzidas quando aumenta-se  $\alpha_{ox}$ .

Já na Fig.9 observamos que a concentração de  $CO$  é bem menor para  $\alpha_{ox}=1,4$ .

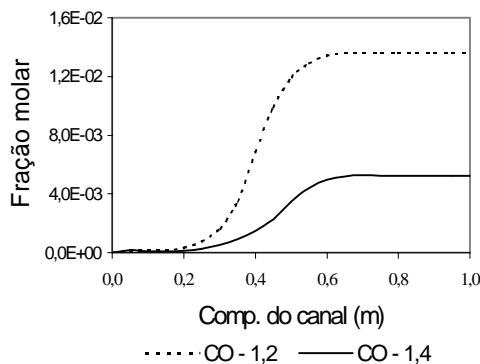


Figura 9 - Comparação da formação de  $CO$  para  $\alpha_{ox}=1,2$  e  $\alpha_{ox}=1,4$

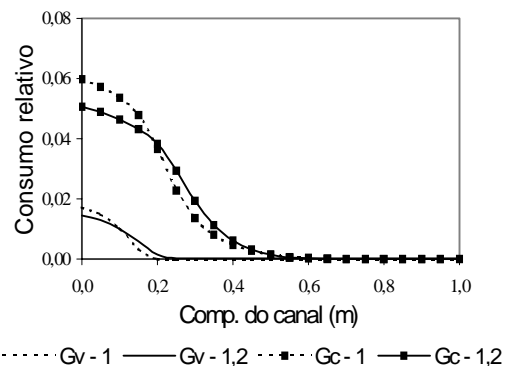


Figura 10 – Comparação entre o consumo de voláteis e de carbono para  $\alpha_{ox}=1,0$  e  $\alpha_{ox}=1,2$

A Fig.10 ilustra o consumo de voláteis e de carbono para  $\alpha_{ox}=1$  e  $\alpha_{ox}=1,2$ . Antes de qualquer análise devemos lembrar que para  $\alpha_{ox}=1$ , obtêm-se um valor máximo para a temperatura em qualquer processo de combustão. De início, as frações molares das substâncias que compõem a partícula é maior para  $\alpha_{ox}=1$ , pois se a quantidade de ar é menor, aumenta a proporção da massa das partículas no fluxo. Observamos da Fig.10 que a devolatilização ocorre mais rapidamente para  $\alpha_{ox}=1$ . O mesmo não ocorrendo para o carbono. Este fato é explicado por ser  $T_g$  mais alta, acelerando o processo inicial, mas ao final do processo, quando reduz-se a quantidade de  $O_2$  na mistura a combustão do carbono é relativamente atrasada. As concentrações de  $CO$  e  $NO$  são relacionadas na Fig.11. Notemos que a concentração de  $CO$  para  $\alpha_{ox}=1$  é muito maior do que para  $\alpha_{ox}=1,2$ . Já a concentração de  $NO$  é sensivelmente menor para  $\alpha_{ox}=1$ . Estas duas situações ocorrem porque devido a maior temperatura, a função  $\varphi$  tem variação mais rápida. Na Fig.12 comparamos a formação de  $CO_2$  e  $H_2O$  e o consumo de  $O_2$  para  $\alpha_{ox}=1$  e  $\alpha_{ox}=1,2$ . Podemos reparar que para  $\alpha_{ox}=1$  incrementa-se a formação de  $CO_2$  e  $H_2O$  com isto reduz-se ainda mais o nível de  $O_2$  na mistura. Pelo fato da temperatura ser maior, o sistema fica próximo ao equilíbrio químico.

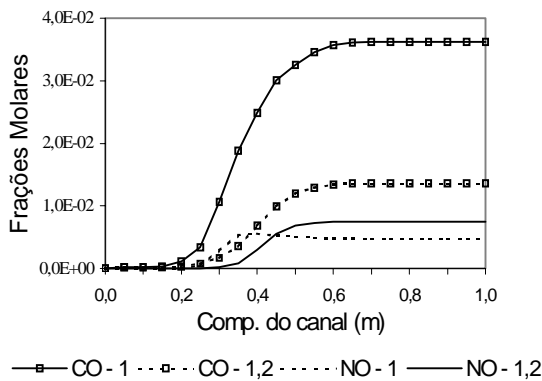


Figura 11 - Formação de  $CO$  e  $NO$  para  $\alpha_{ox}=1,0$  e  $\alpha_{ox}=1,2$

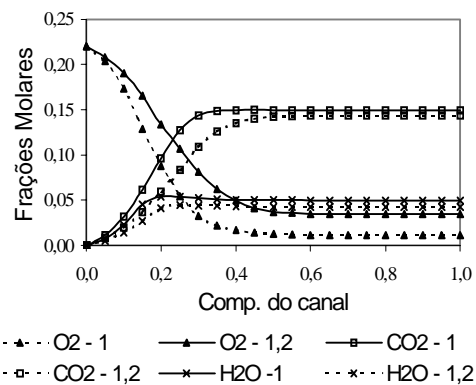


Figura 12 - Formação de  $O_2$ ,  $CO_2$  e  $H_2O$  para  $\alpha_{ox}=1,0$  e  $\alpha_{ox}=1,2$

Na Fig.13 comparamos as concentrações de  $NO$  e  $H_2$  para os regimes  $\alpha_{ox}=0,8$  e  $\alpha_{ox}=1,2$ . Para  $\alpha_{ox}=0,8$  a concentração de  $NO$  cresce rapidamente até atingir um máximo e depois diminui assumindo valor inferior a  $\alpha_{ox}=1,2$ . Este pico ocorre pois no início temos oxidante de sobra, mas a medida que reduz-se a quantidade de oxidante, a concentração de  $NO$  tende a diminuir.

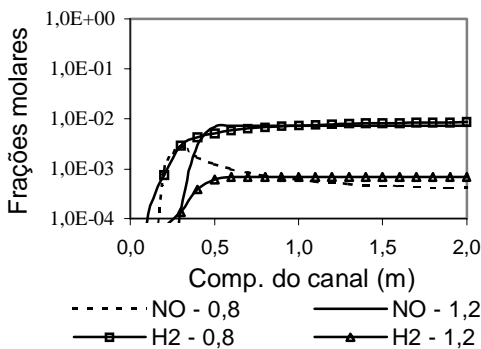


Figura 13 - Frações molares de  $NO$  e  $H_2$  para  $\alpha_{ox}=0,8$  e  $\alpha_{ox}=1,2$

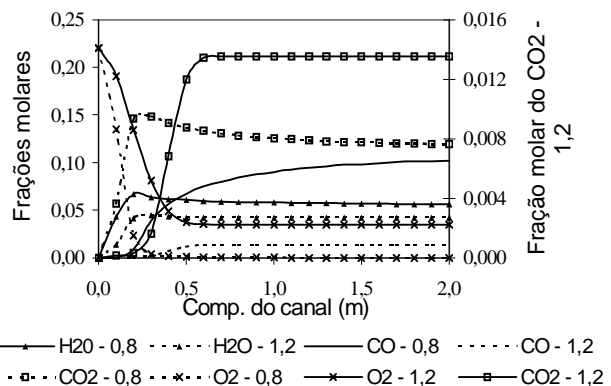


Figura 14 - Frações molares de  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $O_2$  e  $H_2O$  para  $\alpha_{ox}=0,8$  e  $\alpha_{ox}=1,2$



Para  $H_2$  temos uma maior concentração para  $\alpha_{ox}=0,8$ , isto também deve-se a redução de  $O_2$  no ambiente gasoso. Pela Fig.14 analisamos as concentrações de  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $H_2O$  e  $O_2$  para ambos os regimes. É fácil detectar a grande quantidade de  $CO$  produzida, tendência já observada para  $\alpha_{ox}=1$ . Também são produzidos em maior quantidade para o regime de  $\alpha_{ox}=0,8$ ,  $H_2O$  e  $CO_2$  enquanto que  $O_2$  tende a extinguir-se rapidamente.

#### 5.4 Influência da temperatura inicial

A influência da temperatura inicial foi determinada variando-se seus valores de 700, 800, 900, 1000, 1100 e 1300K, de onde conseguimos obter resultados interessantes. A Fig.15 ilustra uma comparação entre os valores de  $\bar{G}_C, \bar{G}_V$  e  $\phi$  para 1000K e 1200K. Como podemos observar ocorre um prolongamento no período de combustão para os três parâmetros analisados. O processo prolonga-se praticamente 2 vezes. Se com uma redução de 200K dobra-se o período de queima, isto significa que a temperatura inicial desempenha um papel fundamental na combustão de partículas de carvão. Na Fig.16 comparamos a formação de  $NO$  e  $CO$  para 1000K e 1200K. Percebemos que com a redução da temperatura reduz-se a formação de ambas as substâncias o que é explicado pelos princípios do equilíbrio químico.

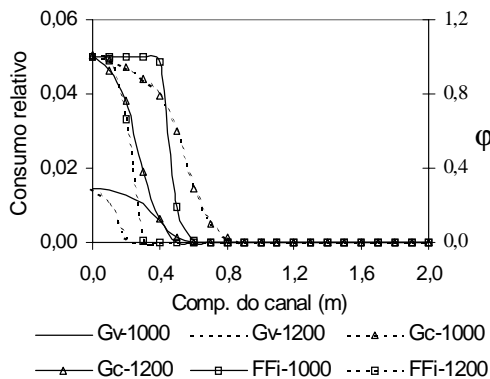


Figura 15 - Consumo relativo e função  $\phi$  =FFi para  $T_i=1000 K$  e  $T_i=1200 K$

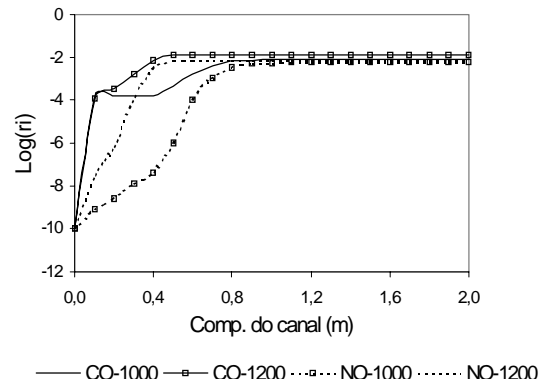


Figura 16 - Frações molares de CO e NO para  $T_i= 1000 K$  e  $T_i= 1200 K$

Simulações mostraram que para 800K em um canal com 2 m a queima praticamente não acontece. A temperatura inicial não é suficiente para que haja ignição e consequentemente a combustão não se completa.

## 6. CONCLUSÕES

- Foi elaborado um esquema físico dos processos de combustão do carvão pulverizado em fluxo reagente que considera a devolatilização, combustão do carbono, liberação de resíduos, reações químicas em fase gasosa, etc.
- Foi implementado o modelo matemático, com algoritmo e aplicativo, os quais são invariantes em relação ao meio gasoso e a composição do carvão.
- As simulações numéricas mostraram a utilidade do modelo e como resultados pode-se destacar : a possibilidade de prever a emissão de poluentes; a passagem brusca de fase da formação do  $CO_2$  à fase de formação do  $CO$  (na superfície do carvão) e a existência da zona quando  $T_p$  supera  $T_g$  ; quanto maior a pressão, maior a taxa de combustão; dependendo do valor de  $\alpha_{ox}$  ele pode determinar picos de temperatura ou alteração na taxa de redução dos voláteis.

- A redução da temperatura inicial do gás determina a menor ou maior extensão do canal ou até mesmo a ausência de ignição.
- É necessário melhorar o modelo para considerar: diferentes diâmetros de partículas; a diferença entre a velocidade do carvão e do meio gasoso; a mistura com pedra calcária; o acréscimo de água no meio reagente, dentre outros e ainda comparar com dados experimentais.

## REFERÊNCIAS

- Aravin, G.S., Vlassov, P.A., e Karasevich, J.K., 1982, “A Investigação do Mecanismo de Ionização Química em Condições da Oxidação com Alta-Temperatura do Metano”, *Física do Combustão e da Explosão*, N1, pp.49-57. (em russo).
- Krioukov, V.G., 1995, “Modelagem Matemática para Emissão de Poluentes”, *Anais do COBEM-CIDIM/95*, Belo Horizonte - MG.
- Krioukov, V.G. & Costa V. J., 1998, “Combustão de carvão Pulverizado em fluxo reagente: Modelagem das características principais”, *Anais do 7º LATCYM*, Salta, Argentina.
- Kobayashi, H. ,Howard, J.B., e Sarofim, A.F., 1976, “Coal Devolatilization at High Temperatures”, *Proceedings, 17 th Inter. Symp. on Combustion, The Combustion Institute*, p. 441.
- Monson, R.C., Germane, G. J., Blackham, A. U. and Smoot, L. D. 1995, “Char Oxidation at Elevated Pressures”, *Combustion and Flame*, N100.
- Pirumov, U.G., e Kamsolov, V.N., 1966, “Cálculo dos escoamentos não equilibrados em tuberias”, *Boletim da AC USSR, Mecanica de Fluido e gás*, N6, pp. 25-33. (em russo).
- Veras, C.A.G., Carvalho, Jr., J.A. e Saastamoinen, J.J., 1996, “Effect on Pressure on Single Particle Combustion Rate”, *Proceedings, 6 th Brazilian Congress of Engineering and Thermal Sciences*, Florianopolos -SC, pp. 225-230.
- Tang, B. e Ohtake, K., 1988, “Computer Simulation and NO Formation in Pulverized-Coal Combustion”, em *Coal Combust. Science and Tecnology of Industrial and Utility Applications*, Ed. Hemisphere Publishing Corporation, pp. 199-206.
- Theis, I.M., 1996, “Limites Energéticos do Desenvolvimento”, *Ed. da FURB*, Blumenau.
- Westbrook, C.K., e Dryer, F.L., 1984, “Chemical Kinetic Modelling of Hydrocarbon Combustion”, *Progress Energy Combustion Sci*, N10, vol. 10, pp. 1-57.

## PULVERIZED COAL COMBUSTION: A NUMERICAL ANALYSIS OF THE MAIN PARAMETERS

*ABSTRACT. In this work propose a mathematical model destined to the pulverized coal combustion in the reacting flow. The model is composed by equations of the chemical kinetics in the exponential form, concomitant equations and of mass change. It is taken into account the composition of the particle, the devolatilization and the transformation of CO and CO<sub>2</sub> as function of the temperature. The numeric researches indicate: larger consumption rate for the volatile ones in relation to the carbon; abrupt passage of the formation of CO<sub>2</sub> for exclusive formation of CO; discharges rates of concentration of NO and CO at the end of the process; the initial temperature of the gas is fundamental so that there are ignition and higher combustion rates; that the coefficient of oxidizer excess is one of the decisive factors in the combustion rate.*

Words key: Numerical analysis, Parameters, combustion Products.