



UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE
CENTRO TECNOLÓGICO
ESCOLA DE ENGENHARIA INDUSTRIAL METALÚRGICA DE VOLTA REDONDA
PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA METALÚRGICA

***DISSERTAÇÃO
DE MESTRADO***

**MODELAMENTO MATEMÁTICO E SIMULAÇÃO
DE UM ENSAIO DE COMBUSTÃO DE CARVÃO
PULVERIZADO.**



**ALUNO : ANDERSON W. S. BALTAZAR
ORIENTADOR : Prof.PhD. JOSÉ A. CASTRO
CO-ORIENTADOR: Prof.Dr.Ing. ALEXANDRE J. SILVA**

2004

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

ANDERSON WILLIAN DE SOUZA BALTAZAR

**“Modelamento Matemático e Simulação de um
Ensaio de Combustão de Carvão
Pulverizado.”**

Dissertação apresentada ao curso Mestrado em metalurgia da Universidade Federal Fluminense, como requisito complementar para obtenção do título de mestre em Engenharia Metalúrgica.

Orientador: Prof. Ph.D. JOSÉ ADILSON DE CASTRO

Co-orientador: Prof.Dr.Ing. ALEXANDRE JOSÉ DA SILVA

Volta Redonda

2004

ANDERSON WILLIAN DE SOUZA BALTAZAR

**“Modelamento Matemático e Simulação de
um Ensaio de Combustão de Carvão
Pulverizado.”**

Aprovada em de de 2004

Banca Examinadora:

Prof.: José Adilson de Castro, Ph.D- Orientador
EEIMVR-UFF- Universidade Federal Fluminense

Prof.: Alexandre José da Silva, Dr. Ing- Co-orientador
EEIMVR-UFF- Universidade Federal Fluminense

Prof.: José Carlos D’Abreu, D.Sc
PUC-RIO- Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Eng.º: Marcelo Alves de Carvalho
CSN- Companhia Siderúrgica Nacional

Dedicatória

Esta dissertação eu dedico à minha família, em especial a meus pais que sempre me motivaram e possibilitaram que meus sonhos se realizassem. Dedico às minhas irmãs, tios e primos que muitas vezes aturam meu mau humor e ausência, mas que entendem, suprem e alimentam meus sonhos com amor e incentivo. A dedicação maior porém eu gostaria de fazer ao Deus supremo que tem me dotado de capacidade, amor e forças para superar as minhas dificuldades.

Agradecimentos

O Principal agradecimento a Deus que tem me dado saúde, inteligência e oportunidades. Além, de por em meu caminho pessoas que afetuosamente têm me dado o suporte necessário ao desenvolvimento pessoal e profissional.

A meus pais, irmãs e demais familiares que sempre me incentivaram e têm tornado possível à realização de um sonho.

Aos professores José Adilson de Castro e Alexandre José da Silva meus orientadores, os quais possibilitaram o desenvolvimento deste trabalho, fornecendo o conhecimento e suporte necessários.

À CAPES, pelo auxílio financeiro destinado ao incentivo à pesquisa.

Aos meus amigos do programa de pós-graduação, principalmente ao Rafael, Aduino, Gláucio, Gustavo, Izabella, Ecy, Fabiana, Flávia, Fabíola, Franciene, que têm acompanhado esta jornada, auxiliando com conversas, orientações e conselhos importantes ao desenvolvimento desta dissertação.

Aos demais professores do programa de pós-graduação pela ministração de conhecimentos e dedicação à formação de Engenheiros e Mestres.

À secretaria do curso de pós-graduação em Engenharia metalúrgica, em especial à Márcia, pelo auxílio. Ao suporte Técnico e aos demais funcionários da EEIMVR/UFF por propiciarem o funcionamento desta escola e do equipamento usado para a execução desta dissertação.

Resumo

A injeção de carvão pulverizado é uma boa maneira de se manter a estabilidade de um alto-forno. Além, de reduzir custos operacionais, pois esta técnica viabiliza a utilização de matérias-primas de menor custo que o coque, fato este que a torna desejável e útil, muito utilizada no processo moderno de fabricação de aço.

Apesar da possibilidade aberta para a utilização de um número maior de matérias-primas, a injeção de material particulado via ventaneiras necessita de um critério seletivo, onde algumas propriedades devem ser mantidas, sobretudo para a injeção de carvões, dentre as principais características a serem observadas, estão o teor de cinzas e de enxofre. O modelamento matemático tem aumentado consideravelmente por não demandar altos investimentos, para desenvolver sistemas de injeção. Nesta dissertação um modelamento matemático foi desenvolvido para verificar o comportamento da combustão de carvões de alto e baixo teor de matéria volátil usando resultados de um equipamento de combustão. Os resultados obtidos neste trabalho estão de acordo com resultados previamente verificados na literatura. O modelo foi ainda estendido para simular o canal adutor da raceway, obtendo uma queima de aproximadamente 28 % do carvão pulverizado sendo queimado no canal adutor da raceway, onde se tem principalmente o consumo da matéria volátil, que é queimada fora desta região.

palavras-chave: Alto-Forno, PCI, ventaneiras, raceway, Cinética, Combustão

Abstract

The pulverized coal injection is an attractive technology for keeping the blast furnace stability. It reduces operational costs because this technique makes for the direct use of raw materials which are less expensive than coke, therefore it has been widely used in the modern steelmaking industry.

Although there is the possibility to use several kinds of raw materials, the injection of particulate materials has been massively applied. However, the injection of pulverized material through the tuyeres requires special development of operational techniques. The use of mathematical model to verify the behavior of such materials has increasingly become important since it represent low investment cost and allows precise information of the injection systems. In this thesis, a mathematical modeling of the combustion behavior of coals ranging from low to high volatile matter is developed and validated by using results from a combustion apparatus. The results obtained through this work are in agreement with those previously presented at the literature and the model was extended to simulate the raceway channeling. through this work was founded that around 28 % of the pulverized coal is burned at the raceway channel , chiefly the volatile matter which is firstly burned out in this region.

Keywords: Blast furnace, PCI, Tuyeres, raceway, Kinetic, combustion.

Lista de Figuras

Figura 1.1	Corte longitudinal de um alto-forno mostrando o interior e as regiões em que se divide o forno.	4
Figura 1.2	Estrutura molecular de uma partícula de Carvão.	7
Figura 1.3	Mapa mostrando algumas das principais minas de carvão da região Sul do Brasil.	12
Figura 2.1	Modelo da rotação da partícula proposto por Saito.	17
Figura 2.2	Representação esquemática da dependência da eficiência de combustão com as variáveis do processo segundo Hutny.	20
Figura 2.3	Evolução da estrutura do carvão com o aumento da temperatura conseguido por Lin através fotografia microscópica.	26
Figura 2.4	Modelo das Lanças utilizadas por Maki e trajetória das partículas.	29
Figura 2.5	Gráfico da conversão de carvões gaúchos e suas respectivas misturas obtidos por Gomes em seus experimentos.	44
Figura 3.1	Modelo do equipamento experimental utilizado para verificação do comportamento da combustão de carvão utilizado por KHAIRIL et al.(2001).	48
Figura 3.2	Grid do reator gerado para o modelamento em volumes finitos.	48
Figura 4.1	Gráfico da temperatura da partícula e do gás compara- da com a temperatura da partícula obtida experimentalmente.	70
Figura 4.2	Gráfico das concentrações de O ₂ , CO, CO ₂ obtidos experimental e computacionalmente.	71
Figura 4.3	Comportamento do oxigênio, distribuição de O ₂ no reator	72

Figura 4.4	Distribuição de CO (a) e CO ₂ (b) através do reator.	73
Figura 4.5	Distribuição da temperatura da partícula através do reator.	74
Figura 4.6	Distribuição da temperatura do gás através do reator.	75
Figura 4.7	Comparação entre os dados experimentais e calculados para as composições de O ₂ , CO, CO ₂ para o carvão B.	77
Figura 4.8	Comportamento do oxigênio, distribuição de O ₂ no reator.	78
Figura 4.9	Distribuição de CO (a) e CO ₂ (b) no reator.	79
Figura 4.10	Distribuição da temperatura da partícula no reator.	80
Figura 4.11	Distribuição da temperatura do gás no reator.	80
Figura 4.12	Comparação entre os dados experimentais e calculados para as composições dos gases O ₂ , CO, CO ₂ carvão B com razão de O ₂ de 0,8.	81
Figura 4.13	Comportamento do oxigênio, distribuição do O ₂ no reator.	82
Figura 4.14	Distribuição do CO (a) no reator.	83
Figura 4.14	Distribuição CO ₂ (b) no reator.	84
Figura 4.15	Distribuição do SiO no reator.	84
Figura 4.16	Distribuição da temperatura da partícula no reator.	85
Figura 4.17	Distribuição da temperatura do gás no reator.	85
Figura 4.18	Comportamento das reações de combustão parcial e total.	86
Figura 4.19	Comportamento das reações de combustão dos voláteis e “solution loss”.	87
Figura 4.20	Gráfico da eficiência de combustão em função do percentual de voláteis no carvão.	89
Figura 4.21	Eficiência da combustão em função do enriquecimento do sopro.	90
Figura 4.22	Variação na temperatura máxima da partícula em função do percentual de enriquecimento do sopro.	91

Figura 4.23	Grid mostrando a forma do canal adutor da raceway.	92
Figura 4.24	Distribuição do oxigênio no canal adutor da raceway.	93
Figura 4.25	Distribuição do CO (a) no canal adutor da raceway.	94
Figura 4.25	Distribuição do CO ₂ (b) no canal adutor da raceway.	95
Figura 4.26	Distribuição do carvão no canal adutor da raceway.	96
Figura 4.27	Distribuição da temperatura do gás no canal adutor da raceway.	97
Figura 4.28	Distribuição da temperatura das partículas no canal adutor da raceway.	98
Figura 4.29	Distribuição dos voláteis no canal adutor da raceway.	99
Figura 4.30	Distribuição do vapor d'água no canal adutor da raceway.	99
Figura 4.31	Comportamento das reações dos voláteis no canal adutor da raceway combustão (a) e “solution loss” (b).	100
Figura 4.32	Perfil da velocidade desenvolvida no canal adutor da raceway.	101

Lista de Tabelas

Tabela 3.1	Fases e componentes considerados no modelamento	49
Tabela 3.2.	Termos fonte de Momentum para a equação geral de conservação	50
Tabela 3.3	Termos fonte de Energia para a equação geral de conservação.	52
Tabela 3.4	Termos fonte para as frações mássicas das espécies químicas.	53
Tabela 4.1	Propriedades dos carvões testados.	66
Tabela 4.2	Parâmetros usados no experimento por KHAIRIL et al (2001).	67
Tabela 4.3	Valores Adotados para a função de correção da cinética das Reações de combustão apresentadas no modelamento.	68
Tabela 4.4	Condições de simulação aplicadas nos ensaios para o carvão A.	69
Tabela 4.5	Condições de simulação aplicadas nos ensaios para o carvão B.	76

Lista de Símbolos

A_i	Área superficial do material sólido	[m ⁻¹]
A_{i-j}	Área de contato entre as fases i e j	[m ⁻¹]
a_j	Coeficientes para as equações de $C_{p,j}$	[J/kg.K]
b_j	Coeficientes para as equações de $C_{p,j}$	[J/kg.K ²]
$C_{d_{i-j}}$	Coeficientes de arraste entre as fases i e j	[-]
$C_{p,j}$	Capacidade calorífica da substância j	[J/kg.K]
c_j	Coeficientes para as equações de $C_{p,j}$	
D_H^*	Diâmetro hidráulico	[m]
$D_{i,j}^T$	Difusividade binária para as espécies i e j	[m/s ²]
d_i	Diâmetro da partícula para a fase i	[m]
\dot{E}_{i-j}	Transferência de calor convectivo entre as fases i e j	[W/m ³]
E_i	Emissividade da fase i	[-]
\bar{F}_i^j	Transferência de Momentum entre as fases i e j	[N/m ³]
F_m	Componente de resistência do sólido m ao escoamento do gás	[kg/m ⁴]
f_m	Fração volumétrica do componente m na fase sólida	[-]
Fr_{i-j}	Número de Froude para as fases i e j	[-]
\vec{g}	Aceleração da gravidade	[m/s ²]
H_i	Entalpia da fase i	[J/kg]

ΔH_i^T	Calor de Formação da espécie i a temperatura T	[J/kg]
h_{i-j}	Coefficiente de transferência de calor entre as fases i e j	[W/m ² .K]
k_{Boltzman}	Constante de Boltzman	[J/K]
k_i	Condutividade Térmica da fase i	[W/m.K]
M_j	Peso molecular da espécie j	[kg/kmol]
P_i	Pressão da fase i	[Pa]
Pe_{i-j}	Número de Peclet para as fases i e j	[-]
Pr_{i-j}	Número de Prandtl para as fases i e j	[-]
R	Constante universal dos gases	[J/kmol.K]
R_n	Taxa da Reação n	[kmol/m ³ s]
Re_{i-j}	Número de Reynolds para as fases i e j	[-]
Sc_i	Número de Schmidt para a fase i	[-]
S_ϕ	Termo fonte na equação (3.1)	[-]
T_i	Temperatura da fase i	[K]
\vec{U}_i	Vetor velocidade da fase i	[m/s]
y_j	Fração molar da espécie j	[-]

Símbolos gregos

Γ_ϕ	Coefficiente de difusão na equação. (3.1)	[-]
ε_i	Fração volumétrica da fase i	[-]
\in_j	Energia molecular característica da interação para a espécie j	[J]
ζ_m	Fator de tortuosidade para o componente m	[-]
θ	Ângulo de inclinação da camada sólida	[radianos]
θ_{i-j}	Ângulo de contato entre as fases i e j	[radianos]
ρ_i	Densidade da fase i	[kg/m ³]
ϕ_i	Variável dependente na equação (3.1)	[-]
φ_i	Fator de forma para a fase i	[-]

Subscrito e Sobrescrito

g	Gás
pc	Carvão pulverizado
s	Sólido

Sumário

1- Introdução	1
1.1- O Alto-Forno	3
1.2- Generalidades Sobre Carvão Mineral	5
1.2.1- Análises Imediata e Elementar	6
1.2.2- Poder Calorífico do Carvão	8
1.3- Análise Petrográfica	9
1.4- Carvão Mineral no Brasil	11
1.5- Injeção de Carvão Pulverizado	13
1.6- Objetivo	14
2- Revisão Bibliográfica	15
3- Metodologia	47
3.1- Modelamento Matemático	49
3.2- Termos Fonte	50
3.2.1- Fonte das Equações de Momentum	50
3.2.2- Fonte das Equações de Energia	51
3.2.3- Fonte das Equações de Balanço de Massa	52
3.3- Propriedades das Fases	61
3.3.1- Propriedades do Gás	61
3.3.2- Propriedades do Carvão Pulverizado	64
4- Resultados e Discussões	65
4.1- Validação do Modelo	66
4.1.1- Carvão A	68
4.1.2- Carvão B	75
4.2 Variação de Parâmetros no Modelo	88
4.2.1- Influência do Teor de Matéria Volátil	88
4.2.2- Influência do Enriquecimento do Ar na Eficiência da Combustão	90
4.2.3- Simulação do Canal Adutor da Raceway	92
5- Conclusões	102
6- Sugestões para Trabalhos Futuros	104

7- Referências Bibliográficas

105

7.1- Referências Consultadas e Citadas

108

1-Introdução

O Aço continua sendo a base para o desenvolvimento da economia no mundo.

Em 2003 a produção mundial de aço bruto somou 962,5 milhões de toneladas, conforme levantamento divulgado pelo instituto internacional do ferro e aço (IISI) e a previsão para 2004 é de um bilhão de toneladas. A produção de aço pode ser obtida por dois caminhos principais, por altos-fornos ou reciclagem de sucata. Estudos mostram, no entanto, que em 1999 a produção era quase exclusivamente via altos-fornos.(BERTLING, 1999)

Os fatos acima demonstram que a indústria siderúrgica é um dos carros-chefes da economia. O aço é um metal tão presente no nosso dia a dia, que muitas vezes nem notamos sua presença nas menores coisas do cotidiano. O aço estruturou-se de tal maneira, que um dos principais indicadores de desenvolvimento de um país é seu consumo per capita de aço. Devido à sua importância o processo de fabricação do aço vem sofrendo modificações para a melhora de desempenho. Neste contexto, na década de 80 o processo começou sofrer consideráveis avanços. A maior parte do aço produzido atualmente, provém de altos-fornos, os quais têm sido gradual e exaustivamente estudados na busca constante por melhor desempenho e maior produtividade. Estes estudos visam também um melhor controle do processo, reduzindo perdas de matérias-primas e uma redução do impacto ambiental causado pelo processo.

Na busca por essas melhorias, a injeção de carvão pulverizado (PCI) surgiu como uma técnica complementar importante. Esta técnica, além de assegurar a estabilidade de operação, tornou-se viável por expandir as opções de materiais que podem ser utilizados no processo reduzindo custos. Ela permite o uso de materiais com qualidade inferior a do coque, visto que o processo de fabricação do coque é caro, além do impacto ambiental, devido à ocorrência de emissão de gases e particulados. Os diversos carvões utilizados na injeção, devem obedecer algumas limitações quanto às suas propriedades para a utilização no processo. Não perdendo de vista que todas as propriedades são importantes, pode-se citar a limitação do teor de cinzas em torno de 10% como uma das principais juntamente com um baixo teor de enxofre. (GOMES et al, 2003)

A injeção de carvão pulverizado no alto-forno continua sendo considerada uma tecnologia atrativa, por isso nos anos recentes vem sendo perseguida ativamente, tendo em vista a elevação da taxa de injeção. Taxas elevadas são desejáveis, para estabilização do processo. Porém, alguns problemas técnicos existem e necessitam serem resolvidos para altas taxas de injeção. (MAKI et al, 1996)

Além das vantagens relacionadas à operação e ao meio ambiente um dos fatores essenciais para a utilização desta técnica encontra-se no fator econômico. Como exemplo pode ser citados os carvões brasileiros, que apresentam um elevado teor de cinzas o que é indesejável na utilização em altos-fornos, mas apresentam uma boa combustibilidade e podem ser usados em misturas com outros carvões para redução de custos no processo.

O presente trabalho visa à determinação do potencial de utilização de carvões utilizando modelamento matemático e simulação computacional. O desenvolvimento consiste em um modelo capaz de considerar as propriedades e a fenomenologia envolvida no processo de combustão gás-sólido. A finalidade é obter resultados do comportamento de carvões na região das ventaneiras de um alto-forno, através do uso de um ensaio de combustão. O modelo será validado utilizando experimentos que constam na

literatura. Posteriormente à validação, será verificado a influência de variações dos parâmetros do ensaio e no futuro serão averiguados carvões nacionais, para testar a viabilidade da injeção desses carvões e também a sua combustibilidade em um ensaio próximo da realidade de um alto-forno, ou seja um ensaio capaz de abranger as variações de parâmetros do processo.

1.1- O Alto Forno

O alto forno é um reator químico contra corrente, no qual objetivo é reduzir minérios de ferro a ferro. O principal meio redutor é o carbono, mas devido a adição de outros elementos, tais como carvão, gás e outros no processo a presença de hidrogênio também realiza uma pequena contribuição. (AUSTIN et al, 1997)

O alto-forno divide-se em cinco partes conforme mostrado na figura 1.1:

- Cadinho: Região inferior, onde o material líquido se acumula antes de ser vazado. Tem-se a presença de líquidos, sólidos e gases, com ocorrência de algumas reações;
- Rampa: Região imediatamente acima das ventaneiras, onde se tem a combustão do coque e a raiz da zona coesiva;
- Ventre: Região acima da rampa, onde os gases se expandem e se distribuem através da zona coesiva;
- Cuba: É a maior porção do alto-forno, onde se tem as principais reações. Nessa região tem-se a presença de gases e sólidos;
- Topo: É a parte superior do alto-forno, onde é feita a vedação dos gases e o carregamento de matérias-primas.

No alto-forno, gás quente ascendente troca calor e massa com a carga fria descendente. Desse modo estabelecem-se zonas no interior do forno, nas quais as reações ocorrem. Essas zonas descritas a partir do

carregamento dos materiais no topo são: zona granular, zona de amolecimento e fusão, zona de gotejamento e zona de combustão, a qual é de relevante interesse neste estudo. Porque a zona de combustão localiza-se na seção em frente às ventaneiras, local de ocorrência da reação de combustão do redutor pelo oxigênio proveniente do ar quente soprado e da injeção de carvão pulverizado (PCI). (MACHADO, 2002)

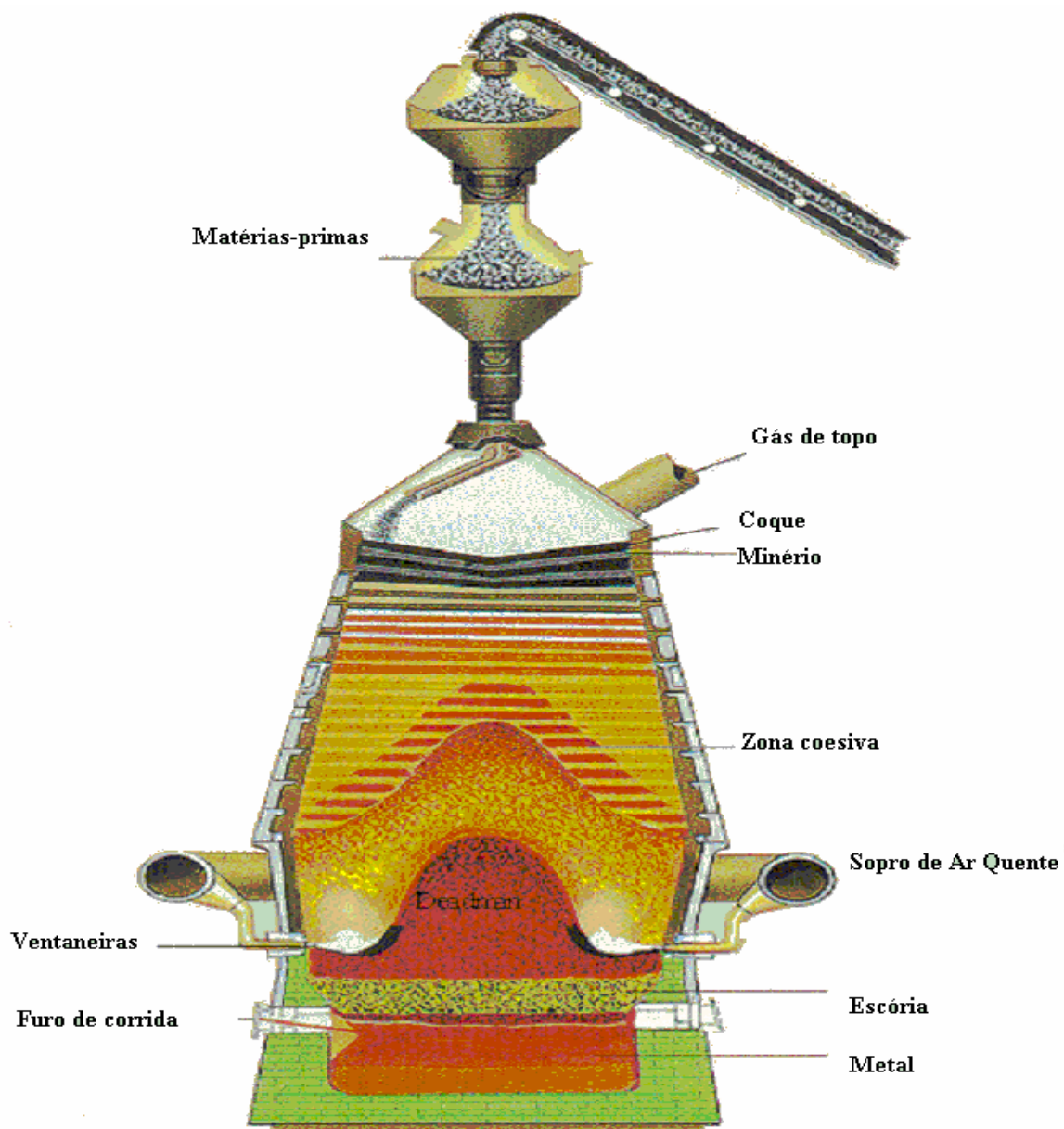


Figura 1.1: Corte longitudinal de um alto-forno mostrando o interior e as regiões em que se divide o forno

1.2-O Carvão Mineral

À partir de meados do século XVIII, a exploração do carvão despontou dentre as atividades humanas, devido ao reconhecimento de sua abundante fonte e energia, indispensável para a movimentação das máquinas.

O carvão mineral permitiu a industrialização em grande escala. O carvão surge também como redutor de minérios, permitindo uma grande expansão da siderurgia e da metalurgia dos não ferrosos. A hulha, fornecendo o coque, permitiu que a siderurgia tomasse um vulto que não seria possível somente com o uso do carvão vegetal. O emprego do carvão mineral como fonte de energia térmica, elétrica e química coloca-o, assim, como fator dos mais relevantes no desenvolvimento material da humanidade.

O carvão contém a parte orgânica formada de macromoléculas contendo C e H, com menores incidências de O, N, S, que formam as moléculas orgânicas mais complexas de elevado peso molecular e de uma parte de silicatos incorporados na fase de deposição do vegetal. A parte orgânica é a parte combustível, enquanto a inorgânica constitui as cinzas.

A composição química do carvão é variável de acordo com seu grau de evolução, quanto mais avançado maior é o teor de carbono na parte orgânica e menor o teor de oxigênio. Os carvões se decompõem produzindo gases (matéria volátil) e deixando um resíduo aglomerado ou não, no caso do resíduo aglomerado obtém-se o coque.

O carvão é extraído das camadas que se acham, às vezes, quase na superfície do solo, porém, mais freqüentemente, a extração se dá em profundidade de centenas de metros. Quando o carvão está raso, faz-se a extração a céu aberto, retirando-se previamente as capas de camadas superficiais estéreis. Na maioria dos casos, entretanto, se faz a extração por poços e galerias, seguindo-se as camadas em profundidade.

O modo de utilização do carvão depende de sua própria natureza e das finalidades em vista. Para fins comerciais, os carvões são classificados de

acordo com a produção de matéria volátil e a natureza do resíduo. Carvões para gás, carvão para vapor, carvão para coque etc., são denominações que correspondem a certas propriedades que o tornam adequados a tais finalidades.

Para combustão em caldeiras é desejável que o carvão tenha pequeno teor de cinzas e forneça moderada quantidade de matéria volátil, de modo a permitir um bom rendimento térmico.

Deve ter o mínimo de enxofre, que dá produtos corrosivos e deve ter poder calorífico elevado, porque a finalidade é produzir calor para ser transformado em outras formas de energia.

Para produzir gás, o carvão deve conter principalmente elevado teor de matéria volátil, cuja parte incondensável vai formar o gás. É vantajoso produzir um resíduo aglomerado (coque) utilizável como combustível, redutor, ou como fonte de gás d'água, devendo ter baixo teor de enxofre e pouca cinza.

Para produção de coque metalúrgico, um dos seus mais importantes usos, o carvão deve apresentar propriedades aglomerantes, as quais se relacionam com a proporção de vitrinita e componentes solúveis em piridina, deve possuir um teor de matéria volátil não muito elevado, deve ter pouco enxofre e um baixo teor de cinzas.

1.3.1- Análises Imediata e Elementar

A análise imediata determina a umidade, as matérias voláteis, as cinzas e o carbono fixo. Frequentemente, informa sobre o teor de enxofre e fósforo. É a mais usual, rápida, sendo facilmente usada no laboratório fornecendo indicações satisfatórias sobre a qualidade do carvão para a maior parte das aplicações.

A análise elementar tem por objetivo determinar teores dos elementos principais: carbono, hidrogênio, oxigênio e outros elementos encontrados em menores quantidades, como o nitrogênio e o enxofre. Enxofre pode ser

proveniente da parte inorgânica principalmente como sulfetos e sulfitos ou da parte orgânica covalentemente ligados em estruturas complexas difíceis de serem removidos química e fisicamente. A figura 1.2 representa uma molécula de carvão, que apresenta forma variável de acordo com a composição química.

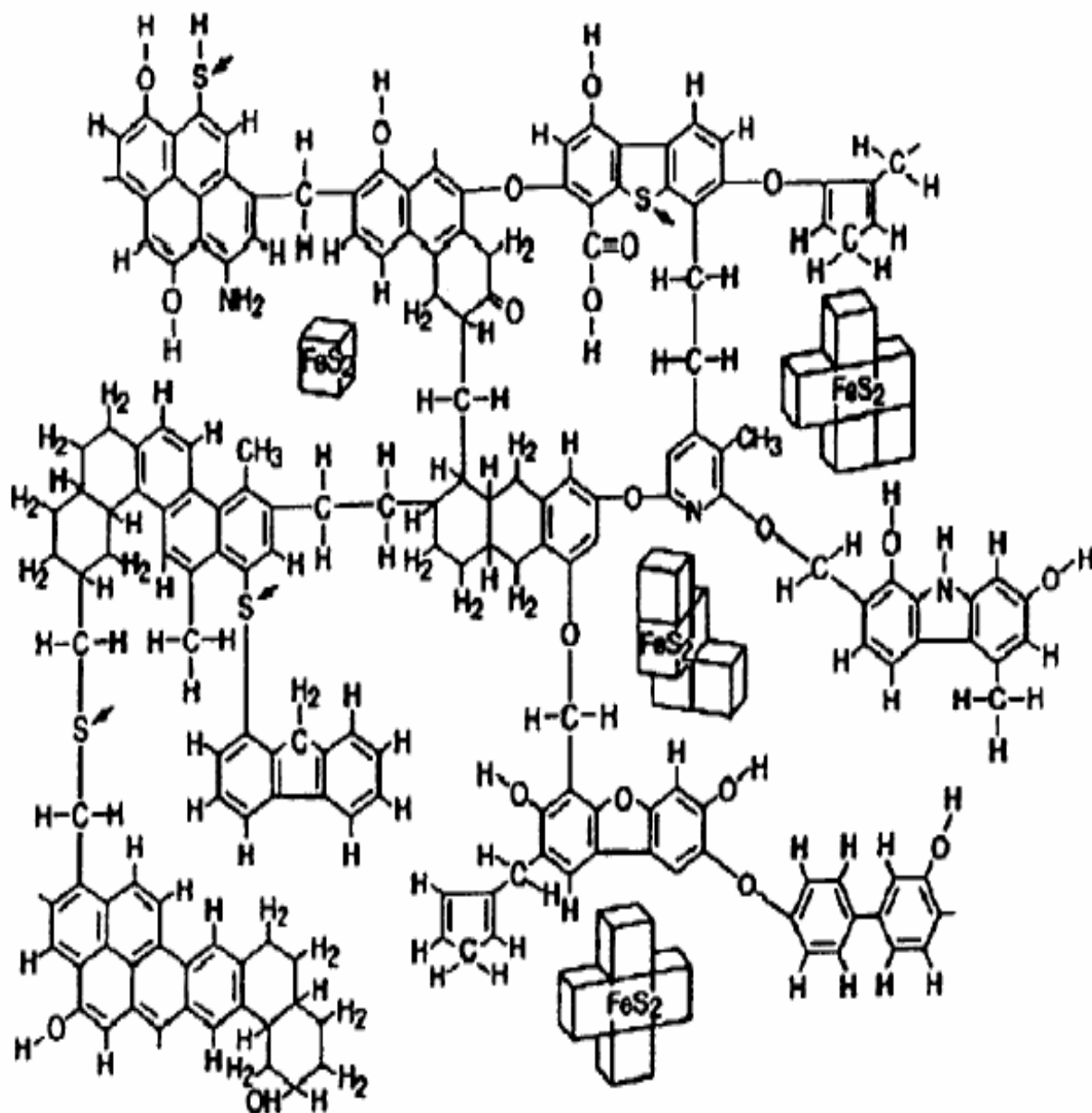


Figura 1.2: Estrutura molecular de uma partícula de carvão.

1.3.2- Poder Calorífico do Carvão

O poder calorífico do carvão é medido pela liberação de calor durante a queima do carvão em atmosfera de oxigênio, em uma bomba calorimétrica, por leitura de diferença de temperatura transmitida a um peso de água constante. (SOLEDADE & FILHO, 1983)

Existem várias formas de expressar o resultado do poder calorífico, dentre as quais destacam-se: poder calorífico superior e poder calorífico inferior.

O poder calorífico superior é a quantidade de calor produzido pela combustão completa da unidade de massa do combustível. O poder calorífico superior dos carvões depende do seu grau de metamorfismo. Ele se relaciona com a matéria volátil, teor de carbono e oxigênio e o poder refletor da vitrinita. (SOLEDADE & FILHO, 1983)

No poder calorífico inferior é levado em conta o teor de hidrogênio existente na formação da água. Neste caso, não se recupera o calor de vaporização da água, portanto seu valor será inferior ao poder calorífico superior, daí a designação de poder calorífico inferior. (SOLEDADE & FILHO, 1983)

Um grande número de correlações estatísticas para relacionar dados experimentais do calor de combustão e análise imediata do carvão têm sido propostas. Após uma revisão de vários modelos para se calcular o poder calorífico dos carvões (MERRICK, 1987 apud ASSIS & SAMPAIO, 1995), observou discrepâncias e com o objetivo de ajustar os dados no intervalo de materiais carbonosos do carvão semi devolatilizado até o alcatrão e a fuligem, a equação não-linear para o cálculo do poder calorífico inferior, o qual é designado neste trabalho pela sigla em letras minúsculas (pci), para diferenciação da sigla de injeção de carvão pulverizado, é determinado como se segue:

$$pci = 32,76C + 121,54H - 14,88O - 1,8N + 4,42S + 4,42H^{0,3} \quad (1.1)$$

Onde, (pci) é o poder calorífico inferior, em J/Kg e C, O, H, N, S são as frações mássicas dos respectivos elementos no carvão.

Segundo Merrick, a utilização desta correlação é melhor que as anteriormente utilizadas, porém é necessário um maior desenvolvimento e validações para fornecer uma previsão que abranja um maior número de situações. (MERRICK, 1987 apud ASSIS & SAMPAIO, 1995)

1.3- Análise Petrográfica

Análise petrográfica é a ciência que estuda e classifica as rochas de acordo com sua composição mineralógica e química, origem e relação entre os grãos minerais constituintes.

Os estudos científicos das rochas se limitavam à descrição macroscópica das amostras junto aos estudos de campo. Em 1856, o inglês Sorby passou a fazer um estudo microscópico para a preparação das rochas, iniciando uma nova etapa na petrografia. Nas últimas décadas os estudos petrográficos se desenvolveram bastante, graças ao aperfeiçoamento de técnicas de estudo ótico e análise química.

As investigações mineralógicas e petrográficas têm grande importância na concentração de minérios e no aproveitamento de outros produtos minerais. Tais investigações, dão idéia da composição da massa mineral e tornam possível elucidar muitas questões técnicas. Como por exemplo, se é necessário triturar os concentrados de um primeiro tratamento, qual o grau de perda de alguns minerais; quais as impurezas encontradas nos concentrados, se devem ser retiradas ou há a possibilidade de uma separação acidental e, qual será seu aproveitamento provável. Estas investigações foram valiosas na revelação de

novas formas de minérios, apontando também a maneira de utilização interdependente de todos os materiais obtidos do trabalho de uma jazida (incluindo jazidas de carvão mineral), que foram anteriormente consideradas como antieconômicas.

O estudo do carvão tem sido de fundamental importância para o desenvolvimento do entendimento sobre as origens do carvão. O estudo do carvão em blocos polidos revolucionou o entendimento sobre carvão (SCOTT, 2002), pois facilitou a nomenclatura dos seus componentes. A partir daí, tem início uma classificação que facilita a compra de carvão no mercado aberto, levando-se em conta as propriedades deles para cada função que ele deve ser utilizado. Estudos recentes têm nascido com o objetivo de entender a natureza do carvão ou para encontrar caminhos para usar a petrografia para beneficiar os usos do carvão. O uso industrial do carvão tem gerado a necessidade do desenvolvimento de uma terminologia que concorde com os estudos técnicos, a fim de relacionar a composição com a finalidade do uso desta substância. (SCOTT, 2002)

Entre os vários componentes do carvão, alguns se destacam e podem ser citados como uma classe dominante e determinante das propriedades dos carvões, como exemplo cita-se: Os macerais que são substâncias orgânicas ou agregados opticamente homogêneos de substâncias orgânicas, que possuem propriedades químicas e físicas distintas e ocorrem naturalmente nos materiais sedimentares, metamórficos e ígneos da terra (SPACKMAN, 1958 apud SCOTT, 2002). Os macerais compreendem vários componentes, dos quais a inertinita e a vitrinita podem ser citados como principais na determinação das características de cada carvão de acordo com a petrografia.

INERTINITA: Caracteriza-se por compreender um grupo, que apresenta baixa refletância e uma faixa média de carbono, além da ausência ou pequena fluorescência. Altas quantidades de inertinita em carvões promovem a formação de poeira durante a exploração de minas e durante a coqueificação. A reatividade da inertinita depende das características físico-químicas dos diferentes macerais e do teor de carbono. (ICCP, 2000)

VITRINITA: Designa um grupo maceral de cor cinza, apresenta fluorescência dependente do grau de betuminização, é rica em estruturas aromáticas e a aromaticidade aumenta com o teor de carbono. A vitrinita contém vários compostos alifáticos, sendo um dos maiores componentes dos carvões as propriedades da vitrinita afeta a maior parte dos processos industriais nos quais carvão é utilizado. (ICCP, 2000)

1.4- Carvão Mineral no Brasil

Os carvões encontrados no Brasil contêm substâncias que tornam sua aplicação como combustível industrial inviável, esta inviabilidade se deve aos elevados teores de cinzas e enxofre, puramente disseminados na matéria carbonosa.

As principais jazidas de carvão se situam em Santa Catarina, Rio Grande do Sul e Paraná, com algumas ocorrências, na Amazônia, Pará, na região Tocantins-Araguaia e na zona ocidental do Piauí.

O carvão nacional tem elevado teor de cinzas. Por isso seu consumo deve se dar próximo às minas. A quantidade de enxofre do carvão ROM (run of mine), varia entre 0,5% e 2,8%. Estes carvões normalmente são laváveis, o que possibilita a redução das cinzas e do enxofre. A jazida de Candiota, no Rio Grande do Sul, é a maior do País. Seu carvão tem reduzida lavabilidade, sendo consumido pulverizado, com teores da ordem de 53 % de cinzas e 1,58 % de enxofre. A figura 1.3 mostra um mapa das principais minas da região sul do Brasil.

O carvão nacional compete com carvões importados na produção de energia elétrica quando as usinas ficam junto às minas. No uso industrial, compete com derivados de petróleo quando as distâncias de transporte são pequenas.

O carvão brasileiro só passou a ter um mercado significativo com a instalação da indústria siderúrgica no país. A produção do carvão metalúrgico gerava, no processo de lavagem, uma grande quantidade de rejeitos que se acumulavam nos locais de produção. A disponibilidade deste combustível de baixo custo, por ser subproduto e a necessidade de eliminação dos rejeitos deram origem aos primeiros projetos de geração, junto às minas, no Rio Grande do Sul e em Santa Catarina.

Após as crises e o embargo do petróleo, a exploração e o consumo do carvão receberam incentivos governamentais. O principal foi o subsídio no transporte, desde as minas até determinados centros de distribuição na região sudeste.

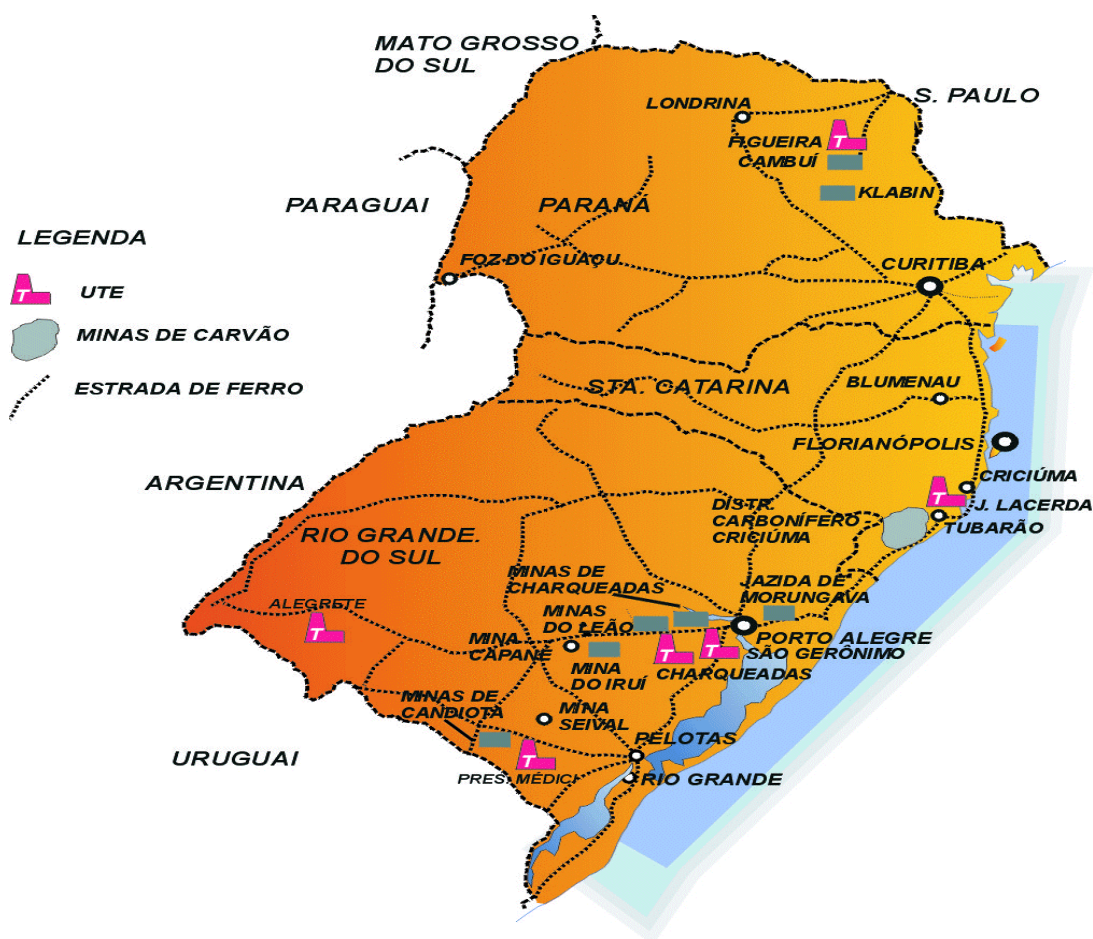


Figura 1.3: Mapa mostrando algumas das principais minas de carvão da região sul do Brasil.

Até 1990, as siderúrgicas nacionais estavam obrigadas a adquirir parte de suas necessidades de carvão metalúrgico de produtores nacionais. Com o fim desta obrigação, este tipo de carvão deixou de ter mercado, por não ser competitivo em relação ao importado. O carvão vapor que, em Santa Catarina, era um subproduto da lavagem do carvão destinado à metalurgia, sustenta hoje a indústria de produção de carvão mineral no Brasil.

1.5- Injeção de Carvão Pulverizado (PCI)

A tecnologia de injeção de carvão pulverizado tem alcançado um grande conceito. Todos os altos-fornos com alta produtividade estão equipados com equipamentos de injeção (PCI).

A injeção de carvão pulverizado lidera a otimização de um grupo de processos usados para a busca de um melhor funcionamento dos altos-fornos. A razão de substituição de coque para carvão pulverizado está na faixa de 0,9 a 1,0; isto reduz custos, visto que a injeção de carvão requer somente 20% do investimento específico para uma planta de coqueificação e apenas 30% dos custos de processamento.

As qualidades necessárias aos carvões dizem respeito especialmente à composição química dos minerais. O principal problema está relacionado aos elementos que compõe e não têm função no processo e podem causar contaminação do produto final.

Álcalis e zinco têm efeitos altamente prejudiciais porque causam distúrbios na regularidade da operação do forno, o que implica em um aumento no consumo dos agentes redutores e em uma menor produtividade do forno, além de afetar a qualidade do metal líquido.

O enxofre é um outro problema, que pode ser eliminado do metal líquido requerendo para isto, que uma parte seja retirada pela escória do alto-forno e outra pelo processo de dessulfuração. No entanto, a remoção pode

gerar custos extremamente elevados. Deve-se citar, que é difícil retirar enxofre e álcalis do alto-forno simultaneamente. (BERTLING, 1999)

Vários outros problemas podem ser causados pelas substâncias presentes no carvão como por exemplo, a umidade e cloro aumentam o ponto de orvalho do gás de topo e impõe uma operação térmica ineficiente. Um aumento da temperatura do gás de topo ou se a temperatura de topo baixar muito, eles causam condensação e corrosão nas linhas de gás e deterioram o equipamento.

1.6- Objetivo

O objetivo desta dissertação é simular um ensaio de combustão para verificar o comportamento da queima de carvão pulverizado, a fim de elucidar e verificar como ocorre a combustão do carvão.

Com este trabalho busca-se a averiguação de modelos cinéticos propostos em literatura, através da simulação computacional das condições dos testes de laboratório com parâmetros controlados e monitorados.

Comparar os resultados obtidos por simulação computacional com os valores da literatura, para que o modelo proposto seja validado com resultados experimentais.

Expandir o modelo para simular o canal de injeção de carvão pulverizado na zona de combustão do alto-forno, ou seja, simular o canal adutor da raceway.

2- Revisão Bibliográfica

Nos anos recentes o comportamento das reações do carvão tem sido objeto de muitos estudos, nos quais procura-se determinar as propriedades químicas e físicas do carvão e do carbono neles contido (LIN et al., 1994). Esse fato deve-se ao aumento do uso de carvões de diferentes origens e classes. Uma maior ênfase começou a ser dada na década de 80, para a determinação da qualidade do carvão para aplicações em combustão. (ZOLIN et al., 1997)

A realçada reatividade do carvão, ou seja, a velocidade com a qual eles reagem, resulta de reações durante a pirólise, reações que produzem carbonos altamente desordenados, originando um grande número de sítios ativos. Estruturas com poros mais abertos resultam em uma maior acessibilidade aos sítios ativos. A estrutura e a reatividade resultante do carvão são determinadas, predominantemente pela classe, origem e as condições da pirólise, tais como a taxa de aquecimento, temperatura final e etc.. (LEE et al., 1991)

Dentre os muitos estudos desenvolvidos sobre carvão alguns serão agora citados por tratarem o comportamento dessa substância de maneira relevante, para o estudo aqui apresentado. Tendo por objetivo ajudar a elucidação das reações do carvão, como elas ocorrem e a influência da estrutura do carvão nas várias reações ocorridas com essa substância.

ADAMS et al. (1989) determinaram gravimetricamente a absorção gasosa em resíduos sólidos parcialmente queimados de carvões. Verificando um considerável desenvolvimento da superfície e da porosidade para uma queima rápida. Estas variações foram correlacionadas com a cinética da combustão. O desenvolvimento desses dois parâmetros ocorria principalmente na primeira metade da queima. No entanto, a oxidação do carvão é ligeiramente acelerada, desde que novas superfícies sejam localizadas nos micros e nos mesoporos, onde o acesso do oxigênio atmosférico é restrito pela difusão lenta.

Segundo Adams, como a oxidação prossegue de forma diferenciada para cada temperatura, a superfície específica aumenta progressivamente, alcançando um máximo em estágios posteriores à queima. Este valor máximo ocorria em torno de 50% da combustão. Observou-se também que ocorria um aumento para queimas rápidas a temperaturas elevadas, tanto que Adams encontrou áreas específicas aumentadas para $152 \text{ m}^2/\text{m}^3$ a 400°C e $93 \text{ m}^2/\text{m}^3$ 500°C comparado com $125 \text{ m}^2/\text{m}^3$ e $83 \text{ m}^2/\text{m}^3$ respectivamente, enquanto que a 300°C o máximo foi de $3,5 \text{ m}^2/\text{m}^3$ para $5,6 \text{ m}^2/\text{m}^3$. A 500°C o menor aumento foi atribuído à tendência de uma menor formação de glóbulos que a 400°C , sugerindo que a taxa de energia transferida fosse insuficiente para manter uma mesma temperatura e regiões quentes eram formadas. A formação de porosidade nas superfícies do carvão incluía a abertura de poros inicialmente fechados. As amostras originais apresentaram principalmente o desenvolvimento de macroporosidade e algumas mesoporosidade, porém as amostras desenvolveram um número maior de faixas de mesoporosidade (tamanho de poro de 2-50 nm de diâmetro) e pouco desenvolvimento de microporosidade durante a queima.

SAITO et al. (1990) examinaram o comportamento da combustão das partículas de carvão pulverizado em alta temperatura e alta concentração de oxigênio. Consideraram um modelo de combustão, no qual ocorria uma rotação da partícula na região de devolatilização, cujo alcance de frequência era de 3000-5000 ciclos/s. Esta rotação foi presumida, como sendo induzida

pela rápida evolução de matéria volátil. A ignição do carbono começava após a devolatilização, sendo que esta começava com a evolução de matéria volátil dos poros da partícula, quando esta era aquecida, desde que a devolatilização prosseguisse lentamente abaixo da temperatura do forno. Porém, a devolatilização ocorria muito rapidamente com a elevação da temperatura do forno, fazendo que o gás oxidante do ambiente fosse arrastado pelo rápido jato de matéria volátil. A figura 2.1 mostra a ignição do carbono pela evolução da matéria volátil conforme proposto por Saito.

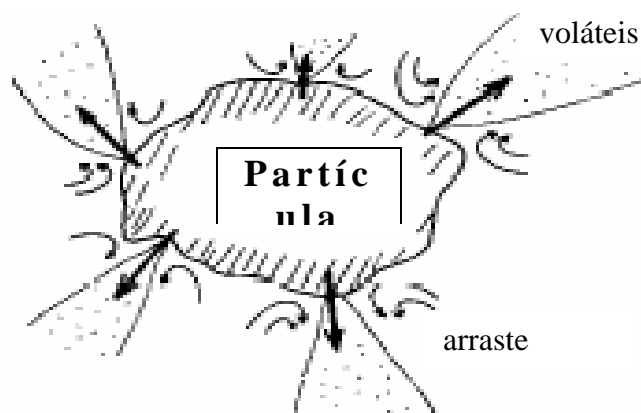


Figura 2.1: Modelo de rotação da partícula proposto por Saito.

O contato entre a superfície da partícula e o gás oxidante devia ser promovido para a entrada do gás. Conseqüentemente, ocorria uma combustão heterogênea do carbono na região de combustão de matéria volátil.

BEER et al. (1987) apud SAITO et al. (1990) mostraram, que a rotação da partícula de 1000 ciclos/s para uma partícula de 50 μ m de diâmetro era induzida pela evolução da matéria volátil durante a devolatilização. A frequência da rotação dependeria da quantidade de matéria volátil contida na matéria, da temperatura do gás na vizinhança e da pressão parcial do oxigênio no forno.

Saito, utilizando fotografia microscópica, verificou também a quebra térmica da partícula na região de devolatilização. Nesta região, o aquecimento rápido das partículas causa um choque térmico na superfície partindo-as, ocasionando evolução de grande quantidade de matéria volátil das rachaduras. Posteriormente, a matéria volátil remanescente evolui dos buracos na superfície da partícula, então muitos poros são formados na superfície da partícula expondo a região de combustão de carbono.

SAITO et al. (1991) dando continuidade a seu trabalho, determinaram a taxa de combustão do carbono sob alta temperatura e alta concentração de oxigênio. A temperatura da partícula foi medida usando-se um pirômetro de duas cores e alta velocidade. A equação do balanço de calor empregada para o cálculo da taxa de combustão, a partir da temperatura da partícula pode ser escrita como:

$$r_c \Delta H = \rho_p C_p \frac{d_p dT_p}{6dt} + h(T_p - T_g) + \phi \sigma (T_p^4 - T_w^4) \quad (2.1)$$

Onde, r_c é a taxa de combustão, C_p é a capacidade térmica específica, ΔH é a variação de entalpia e $\Delta H=9829\text{KJ/Kg}$, h é o coeficiente de transferência de calor convectivo, k é a condutividade térmica, ϕ é a emissividade, ρ_p é a densidade aparente, σ é a constante de Stefan-Boltzmann, d_p é o diâmetro da partícula.

Nesse mesmo trabalho, considerando a pressão parcial de oxigênio determina-se, um modelo para a combustão do carbono sendo controlada pela difusão de um filme gasoso, que pode ser representada pela equação abaixo:

$$r_c = b k_{gO} (C_{Og} - C_{Os}) \quad (2.2)$$

esta equação foi determinada para a reação $C + 1/2O_2 \rightarrow CO$, onde $b=2$.

Para a devolatilização a taxa foi determinada como sendo:

$$r_b = -\frac{\rho_p d_p \ln(1-x)}{6t_b} \quad (2.3)$$

que foi encontrada, a partir da perda de peso do material que é dado por:

$$\frac{dW}{dt} = -r_c a W \quad (2.4)$$

Onde, a é a área superficial externa por unidade de peso.

Verificou-se ainda fenômenos importantes no processo, tais como, a taxa de combustão do carvão, a qual era proporcional a concentração de oxigênio. A combustão do carvão era controlada pela difusão de um filme gasoso na temperatura do gás, desde que a energia de ativação aparente fosse $E=8,4$ KJ/mol. A energia de ativação aparente da taxa de combustão da matéria volátil aumentava gradativamente com o aumento da temperatura da partícula e concentração de oxigênio.

HUTNY et al. (1991) relataram que a eficiência da combustão de carvão no alto-forno depende de muitos fatores, os quais podem ser subdivididos em três grupos como mostrado na figura 2.2 abaixo. A combustão do carvão no alto-forno ocorre sob extremas condições de dificuldade, pois o tempo de residência da partícula de carvão é muito curto no sistema bomba de sopro, ventaneira, canal adutor da raceway.

É citado também que a combustão do carvão no alto-forno é um processo multi-estágio, o qual compreende: aquecimento, devolatilização, mistura, ignição, combustão da fase gasosa e combustão heterogênea. Esses estágios podem desenvolverem-se juntos ou em paralelo durante o processo.

Menciona-se ainda que vários modelos matemáticos têm sido desenvolvidos na busca da averiguação do comportamento de carvão pulverizado. No entanto, para que esse processo vença obstáculos à sua

utilização sem perda da eficiência e avaliação da combustão, é dito que os modelos ainda precisam evoluir, com o intuito de simular a realidade do processo de modo eficaz. Para tanto, diz-se que fatos ocorridos no processo, tais como acúmulo de carvão, queima incompleta de matéria prima entre outros, devem ser levados em consideração ao invés de serem desprezados como normalmente acontece nos modelamentos matemáticos.

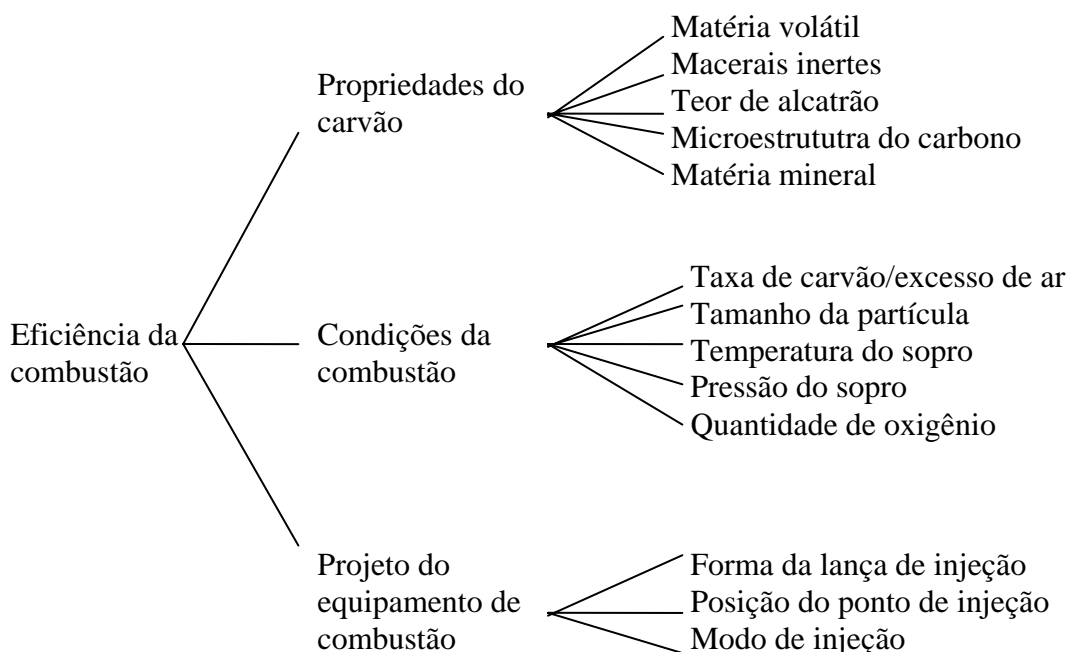


Figura 2.2: Representação esquemática da dependência da eficiência de combustão com as variáveis do processo segundo Hutny.

LEE et al. (1991) determinaram a reatividade do carvão em ar, onde uma das formas para a reatividade média é descrita abaixo:

$$R_{a,x\%} = \Sigma(R_u \Delta w) / \Sigma \Delta w \quad (2.5)$$

Onde, R_u é a taxa da reação instantânea com respeito a carvão não reagido e Δw é a perda de massa ocorrendo em cada intervalo e,

$$R_u = (1/w_u)(dw/dt) \quad (2.6)$$

sendo, w_u o peso do carvão que não reagiu no tempo t e dw/dt a variação da massa com o tempo.

Estudos anteriores ilustram a variação da morfologia do carbono como uma função da pirólise. Análises de imagens, também relatam este fato e mostram que a variação no tamanho e forma das partículas de carbono são também influenciadas pelas condições da pirólise. A importância da estrutura interna encontra-se no fato que ela é um parâmetro chave na determinação do potencial de gaseificação de carvões.

Nesse trabalho as amostras de carvão tiveram sua reatividade determinada a 1 atm de ar. A variação da morfologia em peso do carvão como uma função do tempo de exposição ao ar foi seguida a 683K. As reatividades foram medidas a temperaturas relativamente baixas para reduzir as altas taxas de gaseificação do carbono em ar. Porque, a baixas temperaturas as taxas de gaseificação heterogênea são mantidas abaixo da região onde a transferência de massa domina a reação. A baixas temperaturas pode-se também minimizar variações na estrutura do carvão.

IWANAGA et al. (1991) trataram de um importante fato decorrente da injeção de carvão pulverizado no alto-forno, que é o comportamento do carvão não queimado. O qual é preferencialmente gaseificado pelo CO_2 gasoso e resulta em pequenos efeitos na queda de pressão no forno. O carvão não queimado forma um leito, através do qual os gases difundem. Se não houver diferença de temperatura entre as partículas não queimadas e a suposição de um pseudo-estado estacionário for assumido para o gás, o modelo de Iwanaga propõe as seguintes equações para a taxa de reação de carvão pulverizado não queimado no processo.

$$\left(\frac{D_i}{T}\right)\frac{d^2X_i}{dr^2} + \left\{\frac{d}{dr}\left(\frac{D_i}{T}\right)\frac{2}{r}\right\}\frac{dX_i}{dr} - \frac{R}{P}R_i = 0 \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial C_c}{\partial t} = -k_1 \frac{P(X_{CO_2} - X_{CO_2}^e)}{1 + PX_{CO}/k_2} C_c = R \quad (2.8)$$

Onde, C_c é a concentração de carbono, D_i é o coeficiente de difusão molecular, k_1 e k_2 são as taxas constantes, k_e é a condutividade de calor efetivo, P é a pressão, R_i é a taxa de formação do componente i , X é a concentração de CO e CO_2 , ρ_p é a densidade.

Da investigação das reações de combustão e os efeitos resultantes do carvão pulverizado não queimado no alto-forno, pode-se concluir que a taxa de gaseificação do carvão pulverizado não queimado é muito mais rápida que a do coque. Conclui-se ainda que o hidrogênio promove as reações, enquanto CO trabalha em sentido oposto, ou seja, inibe as reações no alto-forno.

YAMAGUCHI et al. (1992) conduziram, utilizando um equipamento experimental capaz de simular a transferência de calor e as reações na parte inferior do alto-forno, experimentos para verificar a combustão de carvão pulverizado e o consumo de carbono.

A taxa de poeira descarregada pelo topo do equipamento R_d foi determinada pelas equações abaixo:

$$R_{ch} + R_{FC} = R_d \quad (2.9)$$

$$R_{CH}\gamma_{CH} + R_{FC}\gamma_{FC} = R_d\gamma_d \quad (2.10)$$

$$\beta_{CH} = R_{CH} / (R_{CH} + R_{FC}) \quad (2.11)$$

As equações de balanço acima relacionam as quantidades de fuligem e finos de coque que são descarregadas do equipamento pelo gás de topo. Onde R_{CH} e R_{FC} são as quantidades de fuligem e finos de coque descarregadas na poeira de topo, γ_{CH} e γ_{FC} são as quantidades de carbono contido na fuligem e

finos de coque respectivamente, β_{CH} é a fuligem contida na poeira no gás rejeitado de topo.

Com as equações de balanço, condições de sopro e o conhecimento de algumas outras equações. Pode-se concluir que o aumento da temperatura de sopro e o enriquecimento de oxigênio melhoram a eficiência da combustão de carvão pulverizado no canal adutor da raceway e que o enriquecimento de oxigênio tinha um ponto ótimo perto de 4%.

JUNK et al. (1993) propuseram um modelo da dinâmica da combustão do carvão em leito fluidizado. Partindo da premissa que a reação total de combustão pode ser decomposta em dois processos distintos: a combustão da matéria volátil e a combustão do carbono. Quando o carvão entra no leito fluidizado, ele é rapidamente submetido à decomposição térmica, liberando matérias voláteis, tais como metano, alcatrão, e outros hidrocarbonetos. Para os voláteis, a taxa de reação modelada por Junk é dada pela equação:

$$\frac{dV}{dt} = K(V^* - V) \quad (2.12)$$

Onde V^* representa a massa total de voláteis e K é definido pela relação de Arrhenius:

$$K = A \exp(-Ea / RT) \quad (2.13)$$

Para a combustão do carbono a taxa das partículas de carvão R é dada pela equação:

$$R(D) = -\frac{f}{D} \quad (2.14)$$

Onde D é o diâmetro da partícula e f é o coeficiente de taxa de combustão e pode ser calculado por:

$$f = \frac{24ShD_{AB}C_p}{\rho_C} \quad (2.15)$$

Tem-se que Sh é o número de Sherwood, D_{AB} é o coeficiente binário de difusão molecular, C_p é a concentração de oxigênio na emulsão e ρ_C a densidade.

UENO et al. (1993) realizaram um estudo de carvão visando o alcance de uma injeção de 200 Kg/ton. para o desenvolvimento de tecnologia para melhorar a estabilidade da operação do forno, tendo como base experimentos que alcançaram a injeção de 170-180 Kg/ton. Foi utilizado um reator cilíndrico vertical, do qual se retirava amostras ao longo de seu comprimento, para que fossem analisadas. As amostras tiveram sua perda de massa e a estrutura do carbono analisadas. Com esta análise pôde-se verificar, que após a retirada da matéria volátil por N_2 quente expunha-se uma fina parede de carbono. O interior é, então, facilmente colocado em contato com o gás para a combustão, devido à porosidade do carvão e uma maior facilidade de ocorrência da difusão. Nesse trabalho também foi introduzido o uso do fator Q e o cálculo da energia de ativação e do fator de frequência k_0 em função das condições de sopro, onde se tem as equações abaixo:

$$Q = 0,96 \times 10^{-3} T_b + 4,60 \times 10^{-2} C_b - 3,90 \quad (2.16)$$

$$E = -2,26 \times 10^{-2} C_b^2 + 4,82 \times 10^{-4} C_b - 2,04 \times 10^{-6} \quad (2.17)$$

$$k_0 = -1,11 \times 10^3 C_b + 1,96 \times 10^5 C_b - 8,55 \times 10^6 \quad (2.18)$$

O fator Q governa o rendimento final de voláteis e sendo calculado através das condições de sopro, torna-se uma boa aproximação para o cálculo dos parâmetros da taxa de devolatilização. Têm-se, portanto, as equações abaixo para o rendimento de voláteis para a velocidade específica da reação e taxa da reação respectivamente:

$$V^* = Q \times VM \quad (2.19)$$

$$K = k_0 \exp(-E / RT_s) \quad (2.20)$$

$$dV / dt = K(V^* - V) \quad (2.21)$$

Onde, V é o rendimento cumulativo dos voláteis, V^* é o rendimento final de voláteis, K é a taxa constante de reação, k_0 é o fator de freqüência, E é a energia de ativação, VM é a matéria volátil contida no carvão pulverizado por análise imediata, Q é o fator Q , T_s é a temperatura da partícula de carvão pulverizado, T_B é a temperatura de sopro, C_B é o carbono contido no carvão.

No entanto, o fator Q não considera o comportamento dos parâmetros reacionais, com a variação da temperatura durante o processo.

O desprezo da influência da temperatura na energia de ativação e no fator de freqüência pode causar problemas ao modelo, pois ambas dependem da temperatura. Porém, para k_0 esta influência pode ser desprezada para uma faixa pequena de temperatura. Isto pode acarretar uma influência negativa no cálculo da energia de ativação E , devido à grande relação desta variável com a temperatura.

LIN et al. (1994) estudaram as características da combustão do carvão, dando atenção à gaseificação do CO_2 em uma faixa de temperatura de 1173-1773K.

A relação obtida entre a taxa de gaseificação constante $k_{v,s}$ e a taxa de gaseificação total obtida, dX/dt pode ser expressa por:

$$dX / dt = K_{v,s} M_c C_{total} x_{CO_2} E_{f,s} / \rho_c \quad (2.22)$$

Onde M_c é a massa de carbono, C_{total} é a densidade total do gás, x_{CO_2} é a fração molar do CO_2 , ρ_c é a densidade do carbono no carvão e $E_{f,s}$ é o fator de eficiência para uma esfera definido por:

$E_{f,s}$ = [taxa real da reação]/[taxa da reação quando as condições internas e externas se equivalem]

Assumindo-se temperatura uniforme e a difusividade na partícula de carvão, $E_{f,s}$ pode ser expressa por:

$$E_{f,s} = (3/m_s) [1/\tanh(m_s) - (1/m_s)] \quad (2.23)$$

Onde, m_s é o módulo de Thiele para um esfera:

$$m_s = (d_p/2) (K_{v,s}/D_{e,s})^{0.5} \quad (2.24)$$

Tem-se que $D_{e,s}$ é a difusividade efetiva para a esfera e d_p é o diâmetro da esfera. A utilização da difusividade efetiva para a determinação indireta do fator de eficiência demonstra a importância da formação dos poros para uma boa queima do carvão. Devido à necessidade de haver contato entre o carbono que o compõe e o gás reagente. Através de fotografias microscópicas (figura 2.3), é mostrado a variação das estruturas do carbono em função da temperatura demonstrando uma contribuição significativa da necessidade de difusão para uma gaseificação a alta temperatura e a importância de se analisar o fator de eficiência na taxa de gaseificação total.

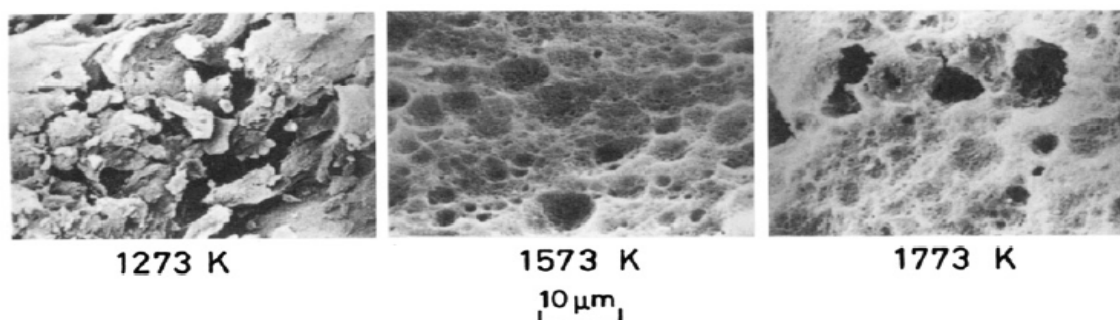


Figura 2.3: Evolução da estrutura do carvão com a variação da temperatura obtida por Lin através de fotografia microscópica.

OHNO et al. (1994) estudaram a combustão de carvão pulverizado na cavidade do canal adutor da raceway, teórica e experimentalmente. Foi obtida uma taxa de combustão por unidade de espaço para uma partícula simples de carvão pulverizado como:

$$R = \frac{W_s}{V_g} \cdot \frac{6}{\rho_p D_p} K C_{O_2} \quad (2.25)$$

Onde R é a taxa de combustão por unidade de volume, W_s é a taxa de escoamento de carvão pulverizado, V_g é a taxa de escoamento do gás, ρ_g é a densidade aparente carvão pulverizado, D_p é o diâmetro da partícula, K é a taxa constante global, C_{O_2} é a concentração molar de oxigênio. A taxa da variação de oxigênio por unidade de tempo corresponde à taxa de combustão, assumindo-se que a taxa de escoamento do gás é constante e pode ser obtida pela equação:

$$-\frac{dC_{O_2}}{d\theta} = R = AC_{O_2} \quad (2.26)$$

Onde, θ é o tempo e A é dado pela equação abaixo:

$$A = \frac{W_s}{V_g} \cdot \frac{6}{\rho_p D_p} k \quad (2.27)$$

A reação de combustão das partículas de carvão pulverizado é obtida por três processos: reação química, difusão de um filme gasoso na superfície da partícula e difusão turbulenta das partículas de oxigênio. A taxa global constante pode ser expressa por:

$$\frac{1}{K} = \frac{1}{k_C} + \frac{1}{k_f} + \frac{1}{k_t} \quad (2.28)$$

Onde k_C é a taxa constante de reação química, k_f é a taxa constante de contorno do filme gasoso e k_t é a taxa constante para a difusão turbulenta.

VAMVUKA et al. (1996) estudaram as propriedades da combustão do carvão pulverizado com aditivos sob condições que simulam as de injeção em um alto-forno (taxa de aquecimento 10^5 K/s, tempo de residência < 20 ms, temperatura final de 1500°C). O teor de carvão, tamanho das partículas e taxa de injeção foram variados. Os aditivos utilizados foram materiais plásticos, espuma, vidro e etc.. As taxas de injeção das misturas foram variadas, no entanto a quantidade de carbono nas amostras eram as mesmas do carvão previamente usado. Na queima do carvão a forte influência do teor de carbono foi claramente evidenciada durante o processo de combustão. A performance dos carvões testados eram dependentes do teor de carbono deles. Para partículas menores que $150\mu\text{m}$, a eficiência de queima seguia a ordem do teor de carbono, enquanto que para partículas maiores que $150\mu\text{m}$ a ordem era inversa.

Um aumento na quantidade de aditivo resultou em um decréscimo do grau de queima. A partir destes resultados, propõe-se que seria necessário o desenvolvimento de novas pesquisas na zona de combustão do canal adutor da raceway para a otimização da operação do alto-forno com a injeção de misturas de carvão pulverizado e os aditivos utilizados nesse experimento.

MAKI et al (1996) descreveram o processo de desenvolvimento da lança de injeção para alta combustibilidade e a otimização do método de operação considerando o fenômeno no forno, esse projeto visava uma taxa máxima de injeção de 230 Kg/ton. e atingiu uma taxa média de 218 Kg/ton..

Carvão não queimado era gerado no canal adutor da raceway. Eles são normalmente consumidos pelas reações, tais como “solution loss”. No entanto, se a quantidade de carbono não queimado exceder a taxa de carbono consumido, este será carregado para fora pelo gás de topo. Então, a razão de

substituição de injeção carvão/coque decresce. O controle direto da taxa de consumo de carbono no alto-forno seria impossível, assim a tecnologia chave para o propósito de aumentar a taxa de injeção de carvão pulverizado seria aumentar a eficiência da combustão no canal adutor da raceway. Os fatores como as propriedades do carvão e as condições de sopro influenciam a eficiência da combustão. Portanto, o mais crítico no desenvolvimento foi projetar a lança de injeção para assegurar elevada eficiência da combustão.

A figura 2.4 mostra as trajetórias das partículas de carvão calculadas por um modelo matemático bidimensional, de três tipos de arranjos utilizados: (1)- lança simples convencional; (2)- lança dupla; (3)- lança dupla concêntrica.

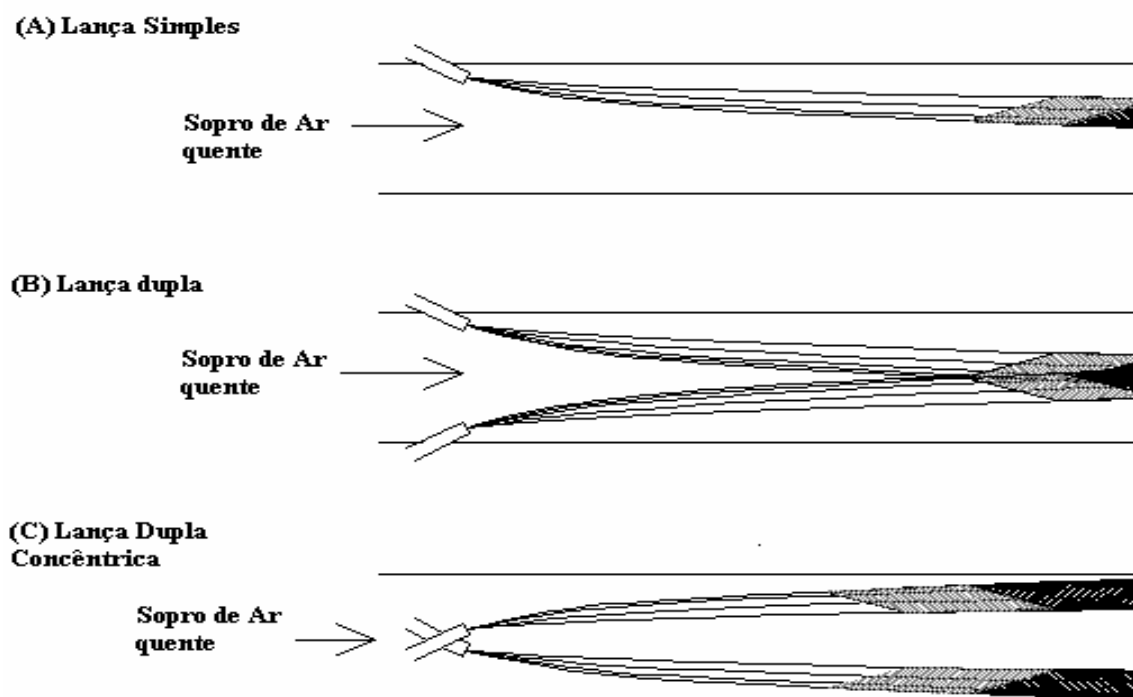


Figura 2.4: Modelos das lanças utilizadas por Maki e a trajetória das partículas.

BABICH et al.(1996) estudaram as dificuldades da combustão das partículas de carvão pulverizado no canal adutor da raceway, devido a

necessidade da gaseificação completa do carvão e as compensações para as variações negativas na tecnologia do processo. A queima do carbono em combustível sólido ocorre por um processo heterogêneo. Este processo ocorre entre a superfície do sólido e a fase gasosa. Ele é determinado pela cinética de queima da partícula (na superfície e na profundidade), pela transferência difusional de oxigênio e produtos da combustão. Para mensurar a intensificação do processo de queima é necessário conhecer as características ou a área de existência delas.

Cálculos foram conduzidos no processo de combustão do carvão pulverizado nas condições do canal adutor da raceway e o processo de queima pôde ser descrito pela equação à seguir:

$$-G_T \frac{d\Omega}{dx} = Mk(1 + \varepsilon)(1 - m)FC_{O_2} \quad (2.29)$$

Onde G_T é a quantidade em massa de combustível passando em 1s através de $1m^2$, $d\Omega/dx$ é a velocidade de queima de carvão pulverizado, C_{O_2} é a concentração de oxigênio, $(1-m)$ é o volume de combustível em uma zona seccional de queima, ε é a relação entre a superfície interna e externa do combustível reagindo, M o coeficiente estequiométrico, k velocidade constante da reação, F superfície interna da superfície da partícula reagindo.

Da equação acima, conclui-se que a velocidade de queima do carvão pulverizado é diretamente proporcional a multiplicação da concentração de oxigênio e a concentração de combustível em um volume de superfície reagindo.

FU et al. (1997) tentaram determinar as taxas de queima para os propósitos da engenharia considerando para cada carvão na temperatura e concentração de oxigênio uma faixa de tamanho das partículas. Nesse trabalho busca-se a determinação do relacionamento entre energia de ativação E , fator de frequência $k_{o, ch}$ e as propriedades do carvão. A taxa de combustão do carvão foi também verificada considerando que esta é afetada principalmente

por dois fatores: um inclui os fatores químicos, como tipo de carbono, sítios ativos, catálise pela cinza e etc., o outro fatores físicos, tais como a área superficial específica, porosidade ou difusão superficial. A energia de ativação e o fator de frequência são afetados por ambos os fatores, então variavam com o tipo de carvão.

Determinou-se, então a taxa específica para a reação $C_{(g)} + 1/2O_{2(g)} \rightarrow CO_{(g)}$ como sendo:

$$g_C = k_{o,C} f(S) \rho_S Y_{O,S} \exp(-E/RT_p) \quad (2.30)$$

Onde S é a área superficial específica. A função f(S) denota os efeitos da área superficial específica na taxa de queima, $Y_{O,S}$ é a concentração de oxigênio na superfície do carbono ou carvão. Definindo:

$$k_{O,Ch} = k_{o,C} f(S) \quad (2.31)$$

Como um fator de frequência para a oxidação do carvão; reescreveu-se a taxa de combustão como:

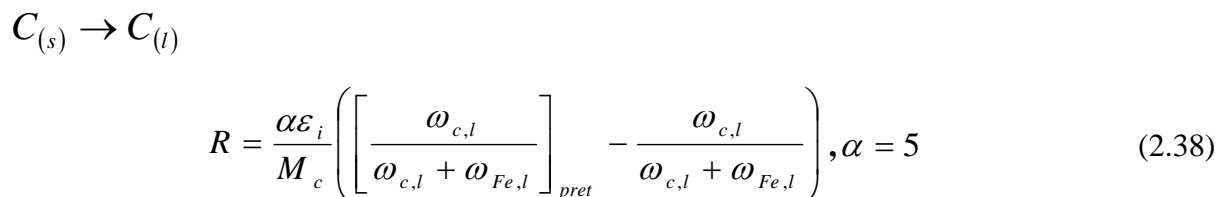
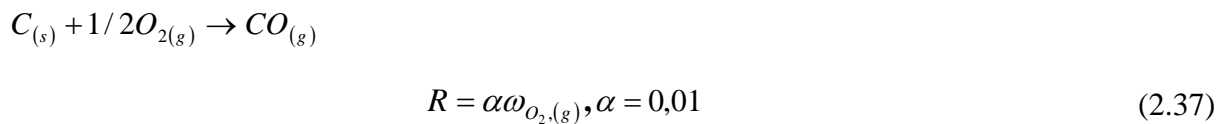
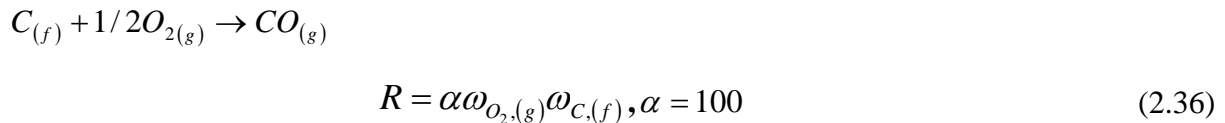
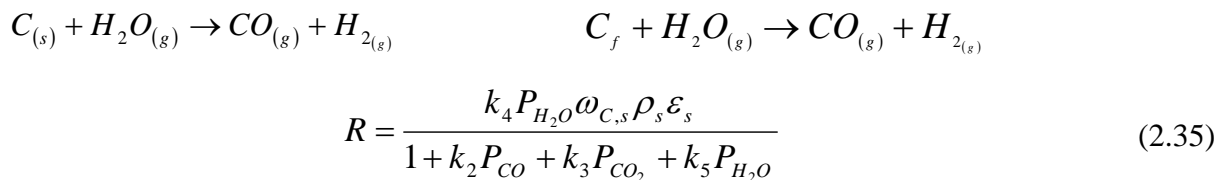
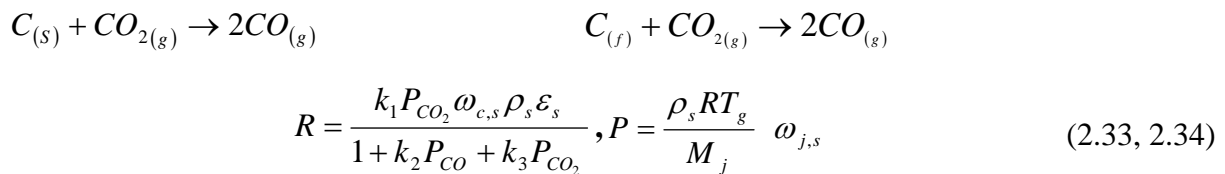
$$g_C = k_{o,Ch} \rho_S Y_{O,S} \exp(-E/RT_p) \quad (2.32)$$

Como f(S) é uma função da área superficial específica, a qual é um fator físico dependente da propriedade do carvão, o valor de $k_{O,Ch}$ dependeria das propriedades do carvão, então, conclui-se que a taxa de queima específica g_C dependeria das propriedades do carvão.

Assumindo-se uma aproximação para a determinação de E e $k_{O,Ch}$, foi assumido que E seria independente das propriedades do carvão e somente seria função da temperatura da partícula T_p ; enquanto, o fator de frequência dependeria das propriedades do carvão.

AUSTIN et al. (1997) utilizaram um modelo para quatro fluidos, para analisar as reações que ocorrem em um alto-forno. Austin considerou em seu modelo bidimensional axissimétrico a massa, o momentum, entalpia e a conservação das espécies químicas para quatro fases em estado estacionário. As fases consideradas por Austin são gás (CO, CO₂, H₂, O₂, H₂O e N₂); sólido (Fe₂O₃, Fe₃O₄, Fe_wO, Fe, ganga, C e cinza de coque); líquido (Fe_wO, Fe, escória e C dissolvido); finos (C e cinza), para cada fase a soma das frações mássicas das espécies químicas são unitárias.

Para o carvão as reações consideradas estão listadas abaixo com suas respectivas taxas de Reação:



Nas equações acima os subscritos s e f referem-se respectivamente a sólidos graúdos (coque) e finos de carvão.

Outra consideração feita por Austin no desenvolvimento do seu modelo, diz respeito à transferência de silício, pois estas reações são endotérmicas e ocorrem na zona inferior do forno. Sílica é reduzida em SiC sólido ou SiO gasoso. As reações de silício seguem abaixo:

$$SiO_{2(ganga)} \rightarrow SiO_{2(l)} \qquad SiO_{2(cinza)} \rightarrow SiO_{2(l)}$$

$$R = \left(\frac{T_i - T_{\min,j}}{T_{\max,j} - T_{\min,j}} \right) \cdot \sum_{entrada} \frac{(\omega_{j,i} \mu_i \rho_i \varepsilon_i A_{face})}{M_j Vol_{célula}} \quad (2.39)$$

$$SiO_{2(cinza)} + C_{(s)} \leftrightarrow SiO_{(g)} + CO_{(g)}$$

$$R = k\rho_s (\omega_{SiO_2,s} - P_{CO} P_{SiO} / k) \quad (2.40)$$

$$SiO_{2(cinza)} + 3C_{(s)} \leftrightarrow SiC_{(g)} + 2CO_{(g)}$$

$$R = k\rho_s (\omega_{SiO_2,s} - \omega_{SiC,S} P^2_{CO} / k) \quad (2.41)$$

$$SiC_{(s)} + CO_{(g)} \leftrightarrow SiO_{(g)} + 2C_{(s)}$$

$$R = kA_{coque} \rho_s \omega_{SiC,S} / M_{SiC} \quad (2.42)$$

$$SiO_{2(l)} + C_{(s)} \rightarrow SiO_{(diss.)} + CO_{(diss.)} \qquad SiO_{2(diss.)} + CO_{(diss.)} \rightarrow SiO_{(g)} + CO_{(g)}$$

$$R = kA_{coque,escória} \alpha_{SiO_2,escória} / M_{SiO_2} \quad (2.43)$$

$$SiO_{(g)} + C_{(l)} \rightarrow Si_{(l)} + CO_{(g)}$$

$$R = kA_{coque,metal} \rho_g \omega_{SiO,g} / M_{SiO} \quad (2.44)$$

Estas reações de transferência de silício são importantes, por causarem um resfriamento da rampa, devido à redução da sílica. Isto resulta em uma diminuição ligeira na temperatura de escoamento e um aumento na zona coesiva, por causa da reoxidação do SiO, que é exotérmica. No modelo, a produção de SiO é mais dependente da sílica da escória, devido ao longo tempo de contato metal-SiO, do que da sílica contida nas cinzas.

Os símbolos das equações acima estão listados a seguir: A_{ij} é a área de contato entre as fases, $C_{p,i}$ é a capacidade térmica da fase, d_i é o diâmetro médio da partícula para a fase i , K_n é a constante de equilíbrio para reação, K_i é a condutividade térmica da fase, M_j é o peso molecular da espécie j , P_i é a pressão na fase i , R_n é a taxa da reação n , $\omega_{j,i}$ é a fração mássica da espécie j na fase i .

ZOLIN et al. (1998) estudaram a reatividade de carvões usando termogravimetria (TGA) e um reator de escoamento laminar (LFR). Foi verificado nesses experimentos que a taxa de reação à baixa temperatura (TGA) foi de magnitude maior que a alta temperatura (LFR). Isto é atribuído a ocorrência do recozimento térmico do carbono no carvão, como também ao direcionamento do regime de difusão controlado nos testes de (LFR), onde a morfologia da partícula era importante.

O modelo de taxa de reação definido, como uma taxa de combustão normalizada pode ser representada pela equação a seguir:

$$R_{CO} = -\frac{1}{W_0} \frac{dW}{dt} = \frac{dX}{dt} \quad (2.45)$$

Onde W é a massa remanescente de carvão no tempo t e W_0 é a massa inicial de carvão; X refere-se a perda de peso relativo na pirólise do carvão e pode ser escrito como:

$$X = 1 - W/W_0 \quad (2.46)$$

LIU et al. (2000) propuseram um modelo de gaseificação, que inclui o comportamento do carbono no carvão sob pressão em termos da cinética da reação e estrutura do carbono. O modelo foi desenvolvido em um dimensão. A temperatura e composição do gás foram assumidas como uniformes através do reator (radialmente), mas variavam axialmente. A turbulência foi desprezada e

o modelo incluía componentes como aquecimento da partícula; devolatilização (taxa, rendimento e combustão de voláteis), combustão do carvão, gaseificação com dióxido de carbono, vapor e hidrogênio, reações gasosas e equilíbrio, estrutura do poro e difusão, balanço de energia entre a parede, gás e partículas.

Para o rendimento de voláteis tem-se a taxa de reação como:

$$R_v = K_u (V_p^* - V) \quad (2.47)$$

V_p^* é os voláteis contido que podem ser retirados, V o rendimento volátil e K_u a taxa constante para a devolatilização. Liu relata que o comportamento da devolatilização decresce com o aumento da pressão. Pode-se obter uma correlação para pressão e rendimento de voláteis experimentalmente pela equação abaixo:

$$V_p^* = V_{1atm}^* / P_t^{0,13} \quad (2.48)$$

Tem-se que V_p^* é o volátil efetivo retirado do carvão à pressão total P_t ; e V_{1atm}^* é o volátil efetivo retirado a 1 atm. A expressão usada no modelo cinético da combustão do carvão para a incorporação da difusão aparente de um filme gasoso incluindo três componentes de resistência foi obtida como:

$$\frac{1}{R_{O_2}} = \frac{1}{k_D y_{O_2,g}} + \frac{1}{\varepsilon' k_a y_{O_2,g}} + \frac{1}{\varepsilon' k_d} \quad (2.49)$$

Onde, k_D é a taxa de difusão constante, k_a é a taxa de adsorção constante, k_d é a taxa de dessorção constante, $y_{O_2,g}$ é a fração molar do oxigênio e ε' o fator de eficiência. Na reação ocorre a produção de CO e CO₂, a qual pode ter sua razão representada pela equação abaixo:

$$\frac{CO}{CO_2} = 50P_{O_2}^{-0,21} \exp(-3000/T_p) \quad (2.50)$$

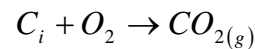
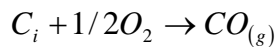
A gaseificação do carvão com CO_2 e H_2O foi examinada, usando análise termogravimétrica, obtendo-se taxas de reação descritas pelas equações:

$$R_{CO_2} = \frac{k_1 P_{CO_2}}{1 + k_2 P_{CO_2} + k_3 P_{CO}} \quad (2.51)$$

$$R_{H_2O} = \frac{k_4 P_{H_2O}}{1 + k_5 P_{CO_2} + k_6 P_{H_2}} \quad (2.52)$$

Onde k_1 a k_6 são parâmetros dependentes da temperatura e são calculados pela equação de Arrhenius como $k = k_0 \exp(-E_a / RT)$.

CASTRO (2000) considerando um modelo matemático multi dimensional, transiente tratou as reações de oxidação do carbono no canal adutor da raceway, a qual recebe carbono proveniente das fases sólidas e carvão pulverizado, que queimam parcialmente obtendo-se CO ou Totalmente produzindo CO_2 .



$$R_{p_i} = \frac{a}{1+a} R_{ave} \quad (2.53)$$

$$R_{t_i} = \frac{1}{1+a} R_{ave} \quad (2.54)$$

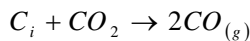
$$R_{ave} = \left(\frac{\varepsilon_g \rho_g \omega_{O_2(g)}}{M_{O_2}} \right) \left\{ \frac{d_i \varphi_i}{A_i D_{O_2, \omega_2}^{T_{ave}} Sh_i} + \frac{1}{\eta k_{ave}} \right\}^{-1} \quad (2.55)$$

$$a = 500 \exp\left(-\frac{12400}{1,987T_i}\right) \quad (2.56)$$

Onde ε é a fração volumétrica da fase i , φ é o fator de forma da fase i , Sh número de Sherwood.

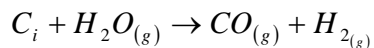
As reações de Boudouard (“solution loss”) e reações com gás d’água também consomem carbono, enquanto prosseguem normalmente, quando a temperatura do gás está na faixa de 900°C. As taxas de reação de Boudouard (“solution loss”) e gás d’água usam troca por difusão e controle cinético. A reação de vaporização da umidade é uma reação homogênea irreversível, responsável por manter o equilíbrio entre carbono e o hidrogênio. Esta reação segue uma lei cinética de segunda ordem e tem sua equação modelada para esta consideração.

Reação de Boudouard (“solution loss”):



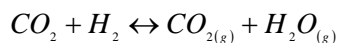
$$R = \frac{\rho_g \omega_{CO_2(g)}}{M_{CO_2}} \left(\frac{1}{A_i K_{film,CO_2}} + \frac{1}{\eta k} \right)^{-1} \quad (2.57)$$

Reação com gás d’água:



$$R = \frac{\rho_g \omega_{H_2O(g)}}{M_{H_2O}} \left(\frac{1}{A_i k_{film,H_2O}} + \frac{1}{\eta k} \right)^{-1} \quad (2.58)$$

Reação “Water gas shift”:



$$R = \frac{1000}{(101325)^2} \varepsilon_s (f_{minério} + f_{sinter} + f_{pellets}) k \left(P_{CO} P_{H_2O} - \frac{P_{CO} P_{H_2O}}{k_{12}} \right) \quad (2.59)$$

Também foi relatado o consumo da matéria volátil do carvão pulverizado por O_2 e CO_2 e citada a dependência da estequiometria com a composição dos voláteis.

$$Voláteis_{(pc)} + \alpha_1 O_{2(g)} \rightarrow \alpha_2 CO_{2(g)} + \alpha_3 H_2 O_{(g)} + \alpha_4 N_{2(g)}$$

$$R = 23,6 \left(\frac{\mu_g \varepsilon_t}{\rho_g k_t} \right)^{1/4} \left(\frac{\varepsilon_t}{k_t} \right) \min \left(\varepsilon_{pc} \rho_{pc} \omega_{MVPC}, \varepsilon_g \omega_{O_2} \frac{M_{MV}}{\alpha_1 M_{O_2}} \right) \quad (2.60)$$

$$Voláteis_{(pc)} + \alpha_5 CO_{2(g)} \rightarrow \alpha_6 CO_{(g)} + \alpha_7 H_{2(g)} + \alpha_8 N_{2(g)}$$

$$R = 23,6 \left(\frac{\mu_g \varepsilon_t}{\rho_g k_t} \right)^{1/4} \left(\frac{\varepsilon_t}{k_t} \right) \min \left(\varepsilon_{pc} \rho_{pc} \omega_{MVPC}, \varepsilon_g \omega_{CO_2} \frac{M_{MV}}{\alpha_5 M_{CO_2}} \right) \quad (2.61)$$

As estequiometrias das equações acima são dadas pela análise elementar do carvão pulverizado (α coeficientes estequiométricos).

Para a transferência de silício considerou-se as seguintes reações:

$$SiO_{2(coque)} + C_{(coque)} \leftrightarrow SiO_{(g)} + CO_{(g)}$$

$$R = k \rho_{coque} \left(\frac{2273 - T_s}{200} \right)_0^1 \left(\frac{\omega_{SiO_2(coque)} - \omega_{SiC} P^2_{CO} / k}{M_{SiO_2}} \right) \quad (2.62)$$

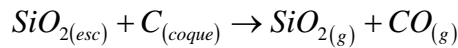
$$SiO_{2(coque)} + 3C_{(coque)} \leftrightarrow SiC_{(g)} + 2CO_{(g)}$$

$$R = k \rho_{coque} \left(\frac{2273 - T_s}{200} \right) \left(\omega_{SiO_2(coque)} - \frac{\omega_{SiC} P^2_{CO} / k}{M_{SiO_2}} \right) \quad (2.63)$$

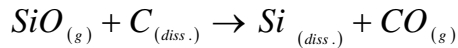
$$SiC_{(coque)} + CO_{(g)} \leftrightarrow SiO_{(g)} + 2C_{(coque)}$$

$$R = k A_{coque} \rho_{coque} \left(\frac{\omega_{SiC}}{M_{SiC}} \right) \quad (2.64)$$

Reação com a escória:

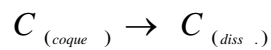


$$R = kA_{coque,esc} a_{SiO_2(esc)} \quad (2.65)$$



$$R = k_{filme,SiO} A_{coque,metal} \rho_{(coque)} \frac{\omega_{SiO}}{M_{SiO}} \quad (2.66)$$

Pode ocorrer ainda a dissolução do carbono, dirigida pela reação a seguir:



$$R = \alpha \frac{\varepsilon_{hm}}{M_c} \left\langle \frac{T_s - T_{fusão,Fe}}{\Delta T_{Fe}} \right\rangle (a_{C,pret.} - a_{c,hm}) \quad (2.67)$$

KHAIRIL et al. (2001) buscavam o conhecimento exato do comportamento das reações de carvão pulverizado a altas temperaturas, ou seja, temperaturas da partícula superiores a 2000 K, que não estava bem elucidado ainda. Seria desejável, no entanto, obter ou medir alguns parâmetros chave como a evolução da taxa de matéria volátil, taxa de reação do carbono fixo, variação da área superficial específica e temperatura da partícula, para o desenvolvimento e avanço da tecnologia da reação de carvão. Neste estudo, Khairil utilizou um reator horizontal para a combustão/gaseificação do carvão pulverizado. Foi utilizado um pré-combustor para produzir alta temperatura, ar quente e alta concentração de oxigênio. Os parâmetros fundamentais de reação como a taxa de evolução da matéria volátil, o comportamento da reação de carbono fixo e a variação morfológica da partícula de carvão foram elucidadas principalmente por amostragem e subseqüentemente analisando o gás da reação e partículas reagentes, medindo a temperatura instantânea da partícula durante a reação.

No experimento as velocidades de entrada do gás e do carvão pulverizado foram de 20 m/s e 10 m/s respectivamente. Enquanto, o tempo de residência médio foi de 0,01s.

Durante os experimentos mediu-se a temperatura instantânea das partículas opticamente e a conversão da matéria volátil reagindo na partícula foi analisada. Esta análise possibilitou estimar a taxa de evolução da matéria volátil baseado na temperatura da partícula. A taxa de evolução da matéria volátil foi expressa pela equação:

$$\frac{dX_{VM}}{dt} = kA \quad (2.68)$$

Onde X_{VM} é a conversão da matéria volátil, t é o tempo médio de residência da partícula, A indica a área superficial específica das partículas de carvão e k é a taxa constante de evolução da matéria volátil.

ZHOU et al. (2002) utilizaram modelo matemático para a trajetória de dois fluidos para simular a combustão do carvão e o escoamento gás partícula. A densidade e a velocidade das partículas foram determinadas pela continuidade e equações de momentum, como a equação geral abaixo:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho v_j \phi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) + S_\phi + S_{p\phi} \quad (2.69)$$

Onde ϕ é a variável generalizada, Γ_ϕ é o coeficiente de transporte, S_ϕ e $S_{p\phi}$ são os termos fonte da fase gasosa e o termo fonte devido à presença das partículas, respectivamente.

A massa das partículas e a variação da temperatura devido à evaporação, devolatilização, combustão do carbono e a transferência de calor foram determinadas por equações diferenciais ordinárias e por expressões algébricas. A taxa de variação de massa da partícula mS utilizando um modelo de pirólise

e difusão cinética do modelo do carbono foi determinado pelas equações à seguir:

$$\dot{m}_p = \dot{m}_w + \dot{m}_v + \dot{m}_h \quad (2.70)$$

$$\dot{m}_w = \pi d_p Nu D \rho \ln \left(1 + \frac{Y_{ws} - Y_{wg}}{1 - Y_{ws}} \right) \quad (2.71)$$

$$Y_{ws} = B_w \exp \left(-\frac{E_w}{RT_p} \right) \quad (2.72)$$

$$\dot{m}_v = m_c \alpha B_v \exp \left(-\frac{E_v}{RT_p} \right) \quad (2.73)$$

$$\dot{m}_c = -m_c B_v \exp \left(-\frac{E_v}{RT_p} \right) \quad (2.74)$$

$$\dot{m}_p = \pi d_p Nu D \rho \ln \left(\frac{\dot{m}_s / \dot{m}_p - Y_s}{\dot{m}_s / \dot{m}_p - Y_{ss}} \right) \quad (2.75)$$

$$\dot{m}_s = \pi d_p^2 \rho Y_{ss} B_s \exp \left(-\frac{E}{RT_p} \right) \quad (2.76)$$

$$\dot{m}_h = \sum \dot{m}_s \quad (2.77)$$

GUO et al. (2003) utilizando um modelo de trajetória para dois fluidos verificou entre outras coisas a taxa de devolatilização simulando um modelo cinético para reações competitivas. Assumindo, que existem duas reações concorrentes, uma que predomina a baixas temperaturas e outra a temperaturas elevadas, as reações podem ser dadas como se segue:

$$1 - (\alpha_1)R_1 + \alpha_1 V_1 \quad (A)$$

$$(1 - \alpha_2)R_2 + \alpha_2 V_2 \quad (B)$$

Onde V1 e V2 são as variações de voláteis no carvão, R1 e R2 o carbono residual, α_1 assume o valor percentual da matéria volátil obtida na análise imediata, e α_2 é dado pelo valor 0,8 para refletir as características da devolatilização a alta temperatura. A taxa de devolatilização é proporcional a massa de carvão e assumindo modelo cinético de primeira ordem, a taxa de consumo dos voláteis pode ser dada como:

$$\dot{m}_{d,k} = -\alpha_1 m_{d,k} B_{v1} \exp\left(\frac{-E_{v1}}{RT_k}\right) - \alpha_2 m_{d,k} B_{v2} \exp\left(\frac{-E_{v2}}{RT_k}\right) \quad (2.78)$$

A taxa de redução da massa do carvão foi dada como:

$$\dot{m}_{d,k} = -m_{d,k} B_{v1} \exp\left(\frac{-E_{v1}}{RT_k}\right) - m_{d,k} B_{v2} \exp\left(\frac{-E_{v2}}{RT_k}\right) \quad (2.79)$$

Na superfície das partículas do carvão três tipos de reações heterogêneas foram assumidas:



As taxas para estas três reações podem ser escritas como:

$$\dot{m}_{c,k}^A = -\frac{1}{\beta_{ca}} \pi d_k^2 \rho_s Y_{O_2,s} B_A \exp\left(\frac{-E_A}{RT_k}\right) \quad (2.80)$$

$$\dot{m}_{c,k}^B = -\frac{1}{\beta_{cb}} \pi d_k^2 \rho_s Y_{O_2,s} B_B \exp\left(\frac{-E_B}{RT_k}\right) \quad (2.81)$$

$$\dot{m}_{c,k}^c = -\frac{1}{\beta_{cc}} \pi d_k^2 \rho_s Y_{O_2,S} B_c \exp\left(\frac{-E_c}{RT_k}\right) \quad (2.82)$$

Onde β_{ca} , β_{cb} , β_{cc} são as razões estequiométricas da reação na superfície do carvão, Y frações mássicas das substâncias, B fator pré-exponencial.

REIS et al. (2003) estudaram a influência do teor de carbono e da composição maceral na eficiência do canal adutor da raceway do alto-forno. Para esse estudo da melhoria de eficiência da combustão considerou-se alguns fatores ligados às necessidades do processo como: à natureza do carvão (matéria volátil, refletância média, composição maceral, taxa de substituição, umidade e quantidade de alcatrão gerada); às condições de operação (tamanho da partícula, taxa de carvão/excesso de ar, temperatura e velocidade do ar soprado); às características dos projetos do sistema de injeção de carvão (posição e tipo de lança de injeção). Neste experimento utilizou-se um simulador de combustão da Usiminas, a eficiência da combustão foi medida avaliando-se os teores de CO e CO₂ dos produtos da combustão. Pode-se observar com esse estudo que a combustão completa do carvão é bastante improvável, devido a questões relacionadas à cinética do processo, sobretudo para taxas elevadas de injeção. Isso é devido ao acúmulo inicial de material no alto-forno na região além do canal adutor da raceway ocasionando a formação de “ninhos de pássaro” (bird’s nest), que é composta por finos de coque, gotas de metal e de escória, impermeável à penetração dos gases no “homem morto”.

É relatado nesse trabalho uma boa concordância com estudos anteriores da influência do teor de carbono na eficiência da combustão de um carvão. Esse trabalho pôde comprovar a tendência que um aumento do teor de carbono diminui a eficiência da combustão, ou seja, um aumento relevante da refletância média ou redução da matéria volátil tem influência na combustão.

GOMES et al. (2003) utilizaram misturas de carvões do Rio Grande do Sul com carvões importados utilizados para injeção em altos-fornos na

busca de uma alternativa para a correção dos fatores limitantes à sua utilização como PCI. Esses estudos foram realizados em termobalança, visando avaliar o comportamento do carvão de Faxinal (RS) e carvões importados isolados ou em misturas, quanto à sua reatividade. Esse trabalho demonstrou que tais carvões de alto volátil apresentavam uma reatividade maior que os carvões já utilizados para (PCI) em usinas metalúrgicas, esta reatividade foi atribuída ao elevado teor de vitrinita verificado em análise petrográfica e ao baixo poder refletor da mesma, bem como ao seu menor grau de carbonificação. Os outros carvões apresentavam elevados teores de inertinita, a qual é composta por núcleos aromáticos condensados, sendo a fração mais densa, menos rica em voláteis e menos reativa. Os experimentos foram realizados em termobalança e os carvões gaúchos atingiram a conversão desejada 50%, em quase a metade do tempo em relação aos outros carvões como pode ser visto no gráfico representativo na figura 2.5 obtido por Gomes em seu experimento.

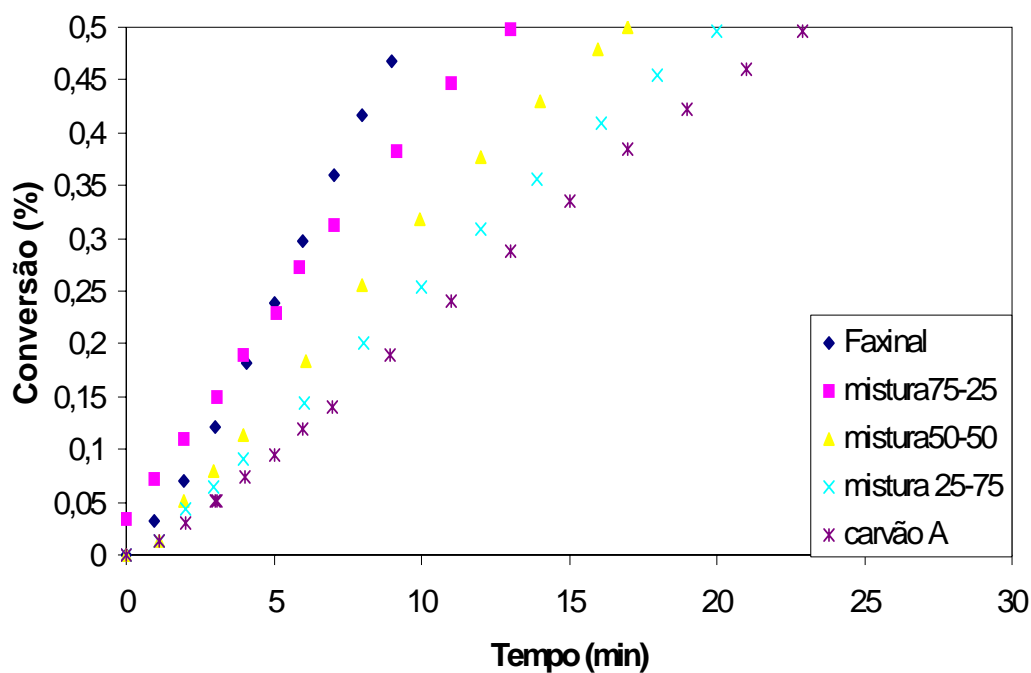


Figura 2.5: Gráfico da conversão de carvão gaúcho e suas respectivas misturas obtidas por Gomes em seus experimentos.

de várias formas e utilizam técnicas diferenciadas para avaliar o

comportamento, a combustibilidade do carvão e as taxas das reações sofridas por estes.

Os trabalhos aqui referenciados foram mencionados com o intuito de se estabelecer uma ordem cronológica dos estudos feitos com esta matéria-prima, bem como a evolução destes através dos anos e a importância do carvão nos processos industriais, que permanece ainda nos dias atuais. Dentro destes trabalhos é reconhecido, que muitos não foram referenciados, mesmo que sua notoriedade dentre as pesquisas do comportamento do carvão seja de considerável relevância. No entanto, devido à gama de estudos e da importância deles deve-se reconhecer que seria praticamente impossível a citação de todos sem se tornar extenso, exaustivo e repetitivo devido à semelhança de muitos deles. Portanto, foi objetivo desta revisão bibliográfica determinar um breve histórico dos trabalhos com carvão, tendo por finalidade demonstrar o que está sendo feito nas pesquisas atuais e o interesse deste Trabalho. Interesse este, que é ampliar o uso de carvões para injeção (PCI), analisando através da simulação computacional um equipamento de estudos da combustão de carvão pulverizado. Fazendo uso de informações sobre as propriedades de carvões, que ainda não têm eficiência comprovada no processo industrial.

Alguns dos trabalhos citados não tiveram suas equações usadas no modelamento. Eles foram importantes no esclarecimento do comportamento do carvão durante a combustão. Como exemplo podem ser citados os trabalhos de ADAMS et al. (1989), SAITO et al. (1990), LIN et al. (1994), que ajudaram na elucidação de como a combustão se processa com a variação da estrutura do carvão e a importância das propriedades do material na eficiência da combustão. Outros trabalhos foram importantes por esclarecerem o comportamento no processo cita-se nesse caso os trabalhos de HUTNY et al. (1991), IWANAGA et al. (1991), MAKI et al. (1996), que servirão para uma melhoria do modelo para simular fenômenos e geometrias mais complexas, como ângulo da lança de injeção, a forma da raceway e o comportamento do carvão não queimado, que pode acumular no reator e etc.. Outros ainda foram

importantes por apresentarem equações semelhantes as propostas no modelamento desta dissertação, onde podem ser citados trabalhos de AUSTIN et al. (1997) e de CASTRO (2000), que estudaram a cinética das reações no alto-forno. Além desses já citados, há ainda na revisão bibliográfica trabalhos que serviram para demonstrar como a presente dissertação pode ser útil no estudo de modelos cinéticos para as reações de combustão de carvão pulverizado, visto que os modelos até o momento apresentados não consideram todas as possíveis reações que ocorrem com as substâncias que compõem este material. Cita-se como exemplo os trabalhos de JUNK et al. (1993), LIU et al. (2000).

3- Metodologia

A presente dissertação se constitui, como mencionado anteriormente, do modelamento matemático e simulação computacional de um ensaio de combustão de carvão.

Foi utilizada a técnica de volumes finitos para a discretização das equações de transporte de massa, momentum e energia para um sistema bifásico. As fases gás e carvão pulverizado são injetadas em um reator tubular utilizado para o experimento, conforme citado na revisão bibliográfica a partir do trabalho de KHAIRIL et al. (2001), para a determinação do comportamento da combustão de carvões. O equipamento experimental pode ser visto na figura 3.1, onde a seção destacada em vermelho corresponde à região (“grid”) de objetivo do estudo. O malha do reator pode ser vista na figura 3.2. Esta simulação teve por objetivo verificar o comportamento do escoamento das fases envolvidas (gás e carvão pulverizado). Buscando também verificar o comportamento das reações que são de relevância nos processos metalúrgicos, que envolvem finos de carvão bem como as várias substâncias que o compõe.

O modelo será desenvolvido com dados experimentais de outros autores, que pesquisam a cinética da combustão e terá seus parâmetros variados para melhor ajuste com resultados experimentais e análise do comportamento da combustão.

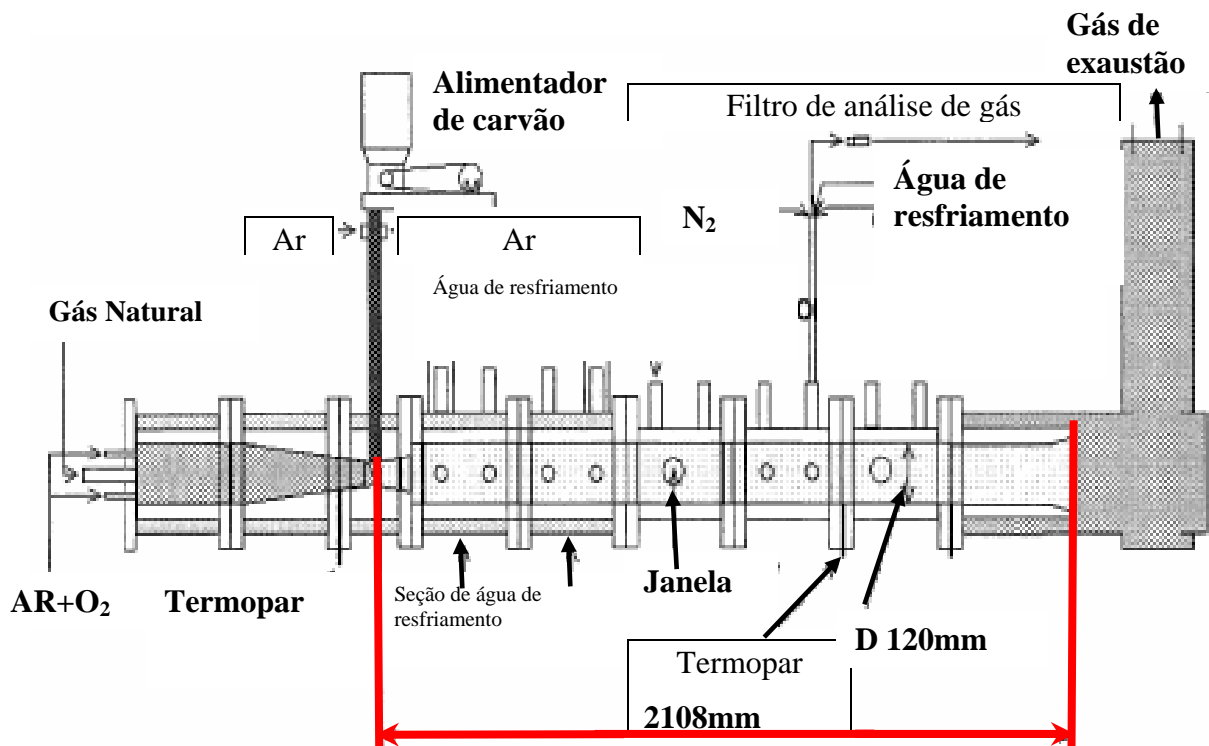


Figura 3.1: Modelo do equipamento experimental utilizado para verificação do comportamento da combustão de carvão utilizado por KHAIRIL et al. (2001).

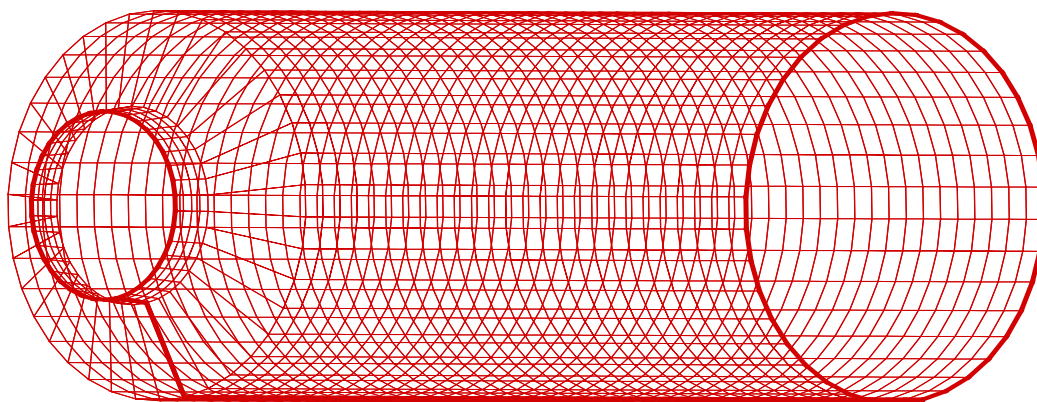


Figura 3.2: Malha do reator gerado para o modelamento em volumes finitos.

3.1- Modelamento Matemático

O modelamento matemático será regido pelas equações de conservação, que podem ser representadas pela equação geral abaixo:

$$\frac{\partial(\varepsilon_i \rho_i \phi_i)}{\partial t} + \text{div}(\varepsilon_i U_i \phi_i) = \text{div}(\varepsilon_i \Gamma_{\phi_i} \text{grad} \phi_i) + S_{\phi_i} \quad (3.1)$$

Onde, o subscripto (i) indica a fase que está sendo considerada e Γ_{ϕ_i} é o coeficiente efetivo de difusão, o qual depende da variável de estado a ser resolvida. Se a equação geral da conservação é a conservação de momentum, o coeficiente Γ_{ϕ_i} é a viscosidade dinâmica, se a equação é de energia, então, o coeficiente de difusão é a condutividade térmica. A composição da fase é calculada usando a equação de conservação com a fração mássica de cada componente, selecionada como variável dependente.

As fases consideradas são gás e carvão pulverizado, entre estas fases alguns componentes serão analisados para verificar seu comportamento durante a reação de queima, as fases e os componentes estão listados na tabela 3.1 abaixo:

Tabela 3.1: Fases e componentes considerados no modelamento

Fases	Componentes
Gás	CO, CO ₂ , O ₂ , H ₂ , H ₂ O, N ₂ , SiO
Carvão Pulverizado	C, SiO ₂ , Voláteis, SiC, Al ₂ O ₃ , MgO, CaO; CaS; FeS; FeS ₂

3.2- Termos Fonte

Termo fonte representa a geração ou consumo de energia, massa e momentum na unidade de volume. Os termos fonte aparecem de várias formas nas equações de transporte. A continuidade e as equações das espécies químicas têm fonte de massa devido as reações químicas e transformação de fases. Fontes de Momentum são derivadas do arraste entre as fases, gradientes de pressão ou gravidade. Fontes de energia surgem da transferência de calor entre as fases, calor de reação e transferência de calor sensível acompanhando transferência de massa, devido as reações químicas e transformações de fase segundo apresentado por CASTRO, (2000).

3.2.1- Fonte das Equações de Momentum

Os termos fonte de momentum para as fase são apresentados na tabela 3.2 abaixo:

Tabela 3.2: Termos fonte de Momentum para a equação geral de conservação.

Fases	Termos Fonte
Gás	$S_{\phi} = -grad[P_g] - \vec{F}_g^{PC}$
Carvão Pulverizado	$S_{\phi} = -\vec{F}_{PC}^G - \rho_{PC} \epsilon_{PC} \vec{g}$

Para as interações entre as fases gás e carvão pulverizado é usada uma equação de arraste simples da partícula. O coeficiente de arraste usado na equação será dado pela equação modificada por Richardson e Zaki, a qual foi

modificada para tomar conhecimento da existência das partículas vizinhas conforme CASTRO, (2000).

$$F_m = -C_{d_{g-s}} \left[\frac{3\varepsilon_{PC} \rho_{PCi}}{4d_{PC} \varphi_{PC}} \right] \left(\vec{U}_g - \vec{U}_{PCi} \right) \left(\vec{U}_g - \vec{U}_{PCi} \right) \quad (3.2)$$

Onde, o coeficiente de arraste é determinado abaixo:

$$C_{d_{g-PC}} = \left[\frac{24}{\text{Re}_{g-PC}} (1 + a \text{Re}_{g-PC}^b) + \frac{c}{1 + \frac{d}{\text{Re}_{g-PC}}} \left(\frac{\varepsilon_g}{\varepsilon_g - \varepsilon_{PC}} \right)^{-4,65} \right] \quad (3.3)$$

Os termos a, b, c, d são funções do fator de forma (φ) descritas pelas equações a seguir:

$$\ln(a) = 2,3288 - 6,4581 \varphi_{PC} + 2,448 \varphi_{PC}^2,$$

$$b = 0,0964 + 0,5565 \varphi_{PC},$$

$$\ln(c) = 4,905 - 13,8944 \varphi_{PC} + 18,4222 \varphi_{PC}^2 - 10,2599 \varphi_{PC}^3$$

$$\ln(d) = 1,4681 - 12,2584 \varphi_{PC} + 20,7322 \varphi_{PC}^2 + 15,8885 \varphi_{PC}^3$$

3.2.2- Fonte das Equações de Energia

A fonte de energia devido à transferência de calor convectivo é calculada pela equação:

$$\dot{E}_i^j = h_{i-j} A_{i-j} [T_i - T_j] \quad (3.4)$$

O coeficiente de transferência de calor é calculado pela equação de Ranz-Marshall.

$$h_{g-i} = \frac{K_g}{d_i} \left[2,0 + 0,6 (Re_{g-i})^{0,5} (Pr_g)^{1/3} \right] \quad (3.5)$$

A área de contato carvão pulverizado gás pode ser dada pela superfície do sólido remanescente dividida pela quantidade da fase gasosa e a fase pó, baseada na fração volumétrica delas segundo modelo apresentado por CASTRO, (2000).

$$A_{S-i} = \left(\frac{\varepsilon_i}{\varepsilon_g + \sum_{i \in \text{finos}} \varepsilon_i} \right) \left[A_S - \sum_{j \in \text{líquido}} A_{S-j} \right] \quad (3.6)$$

Os termos fonte de energia são apresentados na tabela 3.3 a seguir:

Tabela 3.3: Termos fonte de Energia para a equação geral de conservação.

Fases	Termos Fonte
Gás	$S_\phi = -\dot{E}_g^{PC} + \sum R_n \Delta H_n$
Carvão Pulverizado	$S_\phi = -\dot{E}_{PC}^g + \sum R_n \Delta H_n$

3.2.3- Fonte das Equações de Balanço de Massa

As fontes relacionadas as espécies químicas são listadas na tabela 3.4 abaixo:

Tabela 3.4: Termos fonte para as frações mássicas das espécies químicas.

Componentes	Termos Fonte
CO	$S_{CO} = M_{CO} (R_{(1)} + 2R_{(3)} + R_{(4)} + R_{(5)} + \alpha_6 R_{(7)} + R_{(8)} + 2R_{(9)} - R_{(10)})$
CO₂	$S_{CO_2} = M_{CO_2} (R_{(2)} - R_{(5)} + \alpha_2 R_{(6)} - \alpha_3 R_{(7)})$
H₂	$S_{H_2} = M_{H_2} (R_{(4)} - R_{(5)} + \alpha_7 R_{(7)})$
H₂O	$S_{H_2O} = M_{H_2O} (-R_{(4)} + R_{(5)} + \alpha_3 R_{(6)})$
N₂	$S_{N_2} = M_{N_2} (\alpha_4 R_{(6)} + \alpha_8 R_{(7)})$
O₂	$S_{O_2} = M_{O_2} (-0,5R_{(1)} - \alpha_1 R_{(6)} + \alpha_7 R_{(7)})$
SiO	$S_{SiO} = M_{SiO} (R_{(8)} - R_{(10)})$
SiO₂	$S_{SiO_2} = M_{SiO_2} (-R_{(8)} - R_{(9)})$
Al₂O₃	$S_{Al_2O_3} = -M_{Al_2O_3} R_{(11)}$
CaO	$S_{CaO} = M_{CaO} (R_{(12)} + R_{(14)})$
MgO	$S_{MgO} = -M_{MgO} R_{(13)}$
MV	$S_{MV_{PC}} = -M_{MV_{PC}} (-R_{(6)} - R_{(7)})$
C	$S_{C_{PC}} = -M_{C_{PC}} (-R_{(1)} - R_{(2)} - R_{(3)} - R_{(4)} - R_{(8)} - 3R_{(9)} + 2R_{(10)})$
SiC	$S_{SiC} = -M_{SiC} R_{(9)}$
CaS	$S_{CaS} = -M_{CaS} R_{(14)}$
Fe_{0,877} S	$S_{FeS} = -M_{FeS} R_{(15)}$
FeS₂	$S_{FeS_2} = -M_{FeS_2} R_{(16)}$
SO₂	$S_{SO_2} = M_{SO_2} (R_{(14)} + R_{(15)} + R_{(16)})$

As trocas de Massa entre as fases aparecem devido a reações químicas e transformações de fase. Nesta seção serão apresentadas as reações químicas e as respectivas equações de taxa.

A oxidação do carbono no canal adutor da raceway, ocorre de duas formas, parcialmente produzindo CO equação 1 e totalmente com a produção de CO₂ equação 2.

Combustão

(1)	$C_{PC} + 1/2O_{2(g)} \rightarrow CO_{(g)}$
(2)	$C_{PC} + O_{2(g)} \rightarrow CO_{2(g)}$
$R_{(1)PC} = \frac{a}{1+a} R_{ave}; R_{(2)PC} = \frac{1}{1+a} R_{ave}; R_{ave} = \left(\frac{\varepsilon_g \rho_g \omega_{O_2(g)}}{M_{O_2}} \right) \left\{ \frac{d_i \varphi_i}{A_i D_{O_2, O_2}^{T_{ave}} Sh_i} + \frac{1}{\eta k_{ave}} \right\}^{-1}$	

$$a = 2500 \exp\left(-\frac{12400}{1.987T_i}\right); \quad k_{ave} = 7260RT_g \exp\left(-\frac{17980}{T_{ave}}\right); \quad T_{ave} = \frac{T_g + T_i}{2}; \quad A_i = \frac{6\varepsilon_i}{d_i \varphi_i};$$

$$\eta = \left[\frac{d_i}{6} \sqrt{\frac{k_{ave} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}}}} \right]^{-1} \left\{ \left[\tanh\left(\frac{d_i}{6} \sqrt{\frac{k_{ave} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}}}} \right) \right]^{-1} - \left[\frac{d_i}{2} \sqrt{\frac{k_{ave} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}}}} \right]^{-1} \right\}; \quad \delta_{pc} = 1; \quad \zeta_{pc} = 0.2$$

As reações de Boudouard (“Solution Loss”) equação 3 abaixo e reação de gás d’água equação 4 consomem carbono, enquanto prosseguem significativamente, onde a temperatura do gás está na faixa de 900oC. As taxas de reação de Boudouard (“solution loss”) e gás d’água usam troca por difusão e controle cinético. A reação de vaporização da umidade “water gas shift” equação 5 é a reação responsável por manter o equilíbrio entre o carbono e o hidrogênio. Esta reação segue uma lei cinética de segunda ordem e tem sua equação modelada para esta consideração de acordo com o modelo equacionado apresentado por CASTRO, (2000).

Bourdouard (Solution Loss)

(3)	$C_{PC} + CO_{2(g)} \rightarrow 2CO_{(g)}$
$R_{(3)} = \frac{\rho_g \omega_{CO_2(g)}}{M_{CO_2}} \left(\frac{1}{A_i k_{film,CO_2}} + \frac{1}{\eta k_{(3)}} \right)^{-1}$	

$$k_{(3)i} = \frac{k_1}{1 + k_2 P_{CO} + k_3 P_{CO_2}} \rho_i \varepsilon_i \omega_i 82,056 \times 10^{-3} T_g;$$

$$k_1 = \frac{1}{60} \exp\left(19,875 - \frac{66350}{1,987T_i}\right); k_2 = \exp\left(-6,688 + \frac{21421}{1,987T_i}\right);$$

$$k_3 = \exp\left(31,615 - \frac{88168}{1,987T_i}\right);$$

$$P_{\omega_j} = \frac{82,056 \times 10^{-3} \rho_g T_g \omega_j}{M_{\omega_j}}; (j=CO,CO_2); k_{film,CO_2} = D_{CO_2,N_2}^{T_{ave}} \frac{Sh_i}{d_i \varphi_i};$$

$$\eta = \left[\frac{d_i}{6 \sqrt{\zeta_i D_{O_2,N_2}^{T_{ave}}}} \sqrt{\frac{k_{10,i} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2,N_2}^{T_{ave}}}} \right]^{-1} \left\{ \left[\tanh\left(\frac{d_i}{6 \sqrt{\zeta_i D_{O_2,N_2}^{T_{ave}}}} \sqrt{\frac{k_{10,i} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2,N_2}^{T_{ave}}}} \right) \right]^{-1} - \left[\frac{d_i}{2 \sqrt{\zeta_i D_{O_2,N_2}^{T_{ave}}}} \sqrt{\frac{k_{10,i} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2,N_2}^{T_{ave}}}} \right]^{-1} \right\}; A_i = \frac{6\varepsilon_i}{d_i \varphi_i}; T_{ave} = \frac{T_g + T_i}{2}; \delta_{pc} = 1;$$

$$\zeta_{pc} = 0,2$$

Reação com gás d'água

(4)	$C_{PC} + H_2O_{(g)} \rightarrow CO_{(g)} + H_{2(g)}$
$R_{(4)} = \frac{\rho_g \omega_{H_2O(g)}}{M_{H_2O}} \left(\frac{1}{A_i k_{film,H_2O}} + \frac{1}{\eta k_{(4)}} \right)^{-1}$	

$$k_{(4)} = \frac{k_4}{1 + k_2 P_{CO} + k_3 P_{CO_2} + k_5 P_{H_2O}} \omega_{C(i)} \rho_i \varepsilon_i 82,056 \times 10^{-3} T_g;$$

$$k_{film,H_2O} = D_{H_2O,N_2}^{T_{ave}} \frac{Sh_i}{d_i}; Sh_i = 1,5 Re_g^{0,55}; k_2 = 10,3 \frac{M_{H_2O}}{M_{CO}}; k_3 = \frac{M_{H_2O}}{M_{CO_2}} \exp\left(14,24 - \frac{18350}{T_i}\right);$$

$$A_i = \frac{6\varepsilon_i}{d_i \varphi_i}; k_4 = \frac{1}{3600 M_c} \exp\left(22,35 - \frac{26320}{T_i}\right); k_5 = \exp\left(29,59 - \frac{36760}{T_i}\right);$$

$$\eta = \left[\frac{d_i}{6} \sqrt{\frac{k_{10_i} \delta_i}{\zeta_i D_{H_2O, N_2}^{T_{ave}}}} \right]^{-1} \left\{ \left[\tanh \left(\frac{d_i}{6} \sqrt{\frac{k_{10_i} \delta_i}{\zeta_i D_{H_2O, N_2}^{T_{ave}}}} \right) \right]^{-1} - \left[\frac{d_i}{2} \sqrt{\frac{k_{10_i} \delta_i}{\zeta_i D_{H_2O, N_2}^{T_{ave}}}} \right]^{-1} \right\}; \delta_{pc} = 1; \zeta_{pc} = 0.2;$$

$$P_{\omega_j} = \frac{82,056 \times 10^{-3} \rho_g T_g \omega_j}{M_{\omega_j}}$$

Reação “Water gas shift”

(5)	$CO_{2(g)} + H_{2(g)} \leftrightarrow CO_{(g)} + H_2O_{(g)}$
$R_{(5)} = \frac{1000}{(101325)^2} \varepsilon_s (f_{PC}) k_{(5)} \left(P_{CO} P_{H_2O} - \frac{P_{CO} P_{H_2O}}{k_{(5)}} \right)$	

$$P_{\omega_j} = \frac{82,056 \times 10^{-3} \rho_g T_g \omega_j}{M_{\omega_j}}; k_{(5)} = \exp \left(-3,5414 + \frac{3863,7}{T_i} \right)$$

$$k_{(5)} = \alpha k_1 + (1 - \alpha) k_3, \text{ para, } \left(P_{CO} P_{H_2O} - \frac{P_{CO_2} P_{H_2}}{K_{12}} \right) \geq 0; e,$$

$$k_{(5)} = [\alpha k_2 + (1 - \alpha) k_4] k_{(5)}, \text{ para, } \left(P_{CO} P_{H_2O} - \frac{P_{CO_2} P_{H_2}}{K_{12}} \right) < 0; k_1 = 93,3 \exp \left(\frac{-7,32}{8,3146 \times 10^{-3} T_g} \right);$$

$$k_2 = 136 \exp \left(\frac{-7,75}{8,3146 \times 10^{-3} T_g} \right); k_3 = 1,83 \times 10^{-5} \exp \left(\frac{7,84 \times 10^{-3}}{8,3146 \times 10^{-3} T_g} \right); k_4 = 8,83 \times 10^{-2} \exp \left(\frac{4,56}{8,146 \times 10^{-3} T_g} \right)$$

O consumo da matéria volátil é decorrente de reações tanto com O₂ equação 6, quanto com CO₂ equação 7 e a estequiometria das reações dos voláteis depende da composição dos voláteis conforme CASTRO, (2000).

Combustão dos voláteis

(6)	$Voláteis_{(pc)} + \alpha_1 O_{2(g)} \rightarrow \alpha_2 CO_{2(g)} + \alpha_3 H_2O_{(g)} + \alpha_4 N_{2(g)}$
$R_{(6)} = 23,6 \left(\frac{\mu_g \varepsilon_t}{\rho_g k_t} \right)^{1/4} \left(\frac{\varepsilon_t}{k_t} \right) \min \left(\varepsilon_{pc} \rho_{pc} \omega_{MVPC}, \varepsilon_g \omega_{O_2} \frac{M_{MV}}{\alpha_1 M_{O_2}} \right)$	

(7)	$Voláteis_{(pc)} + \alpha_5 CO_{2(g)} \rightarrow \alpha_6 CO_{(g)} + \alpha_7 H_{2(g)} + \alpha_8 N_{2(g)}$
$R_{(7)} = 23,6 \left(\frac{\mu_g \varepsilon_t}{\rho_g k_t} \right)^{1/4} \left(\frac{\varepsilon_t}{k_t} \right) \min \left(\varepsilon_{pc} \rho_{pc} \omega_{MVPC}, \varepsilon_g \omega_{CO_2}, \frac{M_{MV}}{\alpha_5 M_{CO_2}} \right)$	

$$k_t = \left(0.03 |\bar{U}_g| \right)^2; \varepsilon_t = \frac{k_t^{0.5}}{0.01}$$

A estequiometria das equações 6 e 7 são dadas por análise imediata do carvão pulverizado como se segue (CASTRO, 2000):

$$\delta = \frac{\omega_{C_{VM}}}{M_C} + \frac{\omega_{H_{VM}}}{M_H} + \frac{\omega_{O_{VM}}}{M_O} + \frac{\omega_{N_{VM}}}{M_N}; \alpha_1 = \frac{\omega_{C_{VM}}}{\delta M_C} + \frac{\omega_{H_{VM}}}{4\delta M_H} - \frac{\omega_{O_{VM}}}{2\delta M_O}; \alpha_2 = \frac{\omega_{C_{VM}}}{\delta M_C}; \alpha_3 = \frac{\omega_{H_{VM}}}{4\delta M_H}$$

$$\alpha_4 = \frac{\omega_{O_{VM}}}{2\delta M_O}; \alpha_5 = \frac{\omega_{C_{VM}}}{\delta M_C} - \frac{\omega_{O_{VM}}}{2\delta M_O}; \alpha_6 = \frac{\omega_{C_{VM}}}{\delta M_C} + \alpha_5; \alpha_7 = \frac{\omega_{H_{VM}}}{\delta M_H}; \alpha_8 = \frac{\omega_{N_{VM}}}{2\delta M_N}$$

Para a transferência de silício são citadas as reações abaixo:

Redução da sílica do PCI

(8)	$SiO_{2(PC)} + C_{(PC)} \leftrightarrow SiO_{(g)} + CO_{(g)}$
$R_{(8)} = k_{(8)} \rho_{PC} \left(\frac{2273 - T_s}{200} \right) \left(\omega_{SiO_2(PC)} - \frac{P_{CO} P_{CO_2} / k_{(8)}}{M_{SiO_2}} \right)$	

$$k_{(8)-} = 2 \times 10^4 \exp \left(\frac{-2,89 \times 10^5}{8,314 T_s} \right); K_{(8)} = \exp \left(17,957 - \frac{35896}{T_s} \right)$$

(9)	$SiO_{2(PC)} + 3C_{(PC)} \leftrightarrow SiC_{(g)} + 2CO_{(g)}$
$R_{(9)} = k_{(9)} \rho_{PC} \left(\frac{2273 - T_s}{200} \right)_0^1 \left(\frac{\omega_{SiO_2(PC)} - \omega_{SiC} P^2_{CO} / k_{(9)}}{M_{SiO_2}} \right)$	

$$k_{(9)} = 2,7 \times 10^4 \exp \left(\frac{-2,76 \times 10^5}{8,314 T_s} \right); K_{(9)} = \exp \left(17,760 - \frac{31600}{T_s} \right)$$

(10)	$SiC_{(PC)} + CO_{(g)} \leftrightarrow SiO_{(g)} + 2C_{(PC)}$
$R_{(10)} = k_{(10)} A_{PC} \rho_{PC} \left(\frac{\omega_{SiC}}{M_{SiC}} \right)$	

$$A_{PC} = \frac{6\varepsilon_{PC}}{d_{PC}\varphi_{PC}}; k_{(10)} = 1,91 \times 10^6 \exp\left(\frac{-379000}{8,314T_s}\right)$$

Fusão

(11)	$Al_2O_{3(PC)} \rightarrow Al_2O_{3(escória)}$
(12)	$CaO_{(PC)} \rightarrow CaO_{(escória)}$
(13)	$MgO_{(PC)} \rightarrow MgO_{(escória)}$
$R_n = \left\langle \frac{T_i - T_{fusão\ \phi_j}}{\Delta T_{\phi_j}} \right\rangle_0^1 \frac{\sum_{face} F^k \phi_j^k}{M_{\phi_j}}, \text{ onde k é a superfície do volume de}$ <p style="text-align: center;">controle (k= oeste, leste, norte, sul, topo, fundo).</p> $\Delta T_{\phi_j} = \frac{H_{\phi_j, PC}^{T_{fusão}} - H_{\phi_j, escória}^{T_{fusão}}}{C_{P\ \phi_j}^{T_{fusão}}}$	

O modelo considerará ainda as transformações do enxofre, devido a relevância do comportamento desta substância no processo e os danos que podem ser causados ao equipamento e ao produto final.

O processo da combustão de carvão é um dos maiores emissores de gases sulfurosos na atmosfera. O comportamento do enxofre em ambientes de combustão pode seguir vários caminhos e serem representados por vários mecanismos. Mecanismos estes, que serão aqui representados e simplificados com o intuito de verificar como esta substância se comporta durante a combustão do carvão pulverizado.

O modelo considerará previamente três substâncias que se apresentam nos carvões, que são CaS, FeS e FeS₂. Estas substâncias terão suas taxas representadas e calculadas conforme modelo apresentado a seguir obtidos por (ROWENA et al.,1992), que usou um modelo de retenção de enxofre durante a combustão de carvão pulverizado:

Enxofre

(14)	$CaS_{(PC)} + \frac{3}{2}O_{2(g)} \rightarrow CaO_{(S)} + SO_{2(g)}$
$R_{(14)} = C(R_S x_o A_i \eta + R_S x_o A_e)$	

$$R_s = K_c (RT / M_c) [(A_i + A_e) / A_i]; K_c = 55 \exp(-20141/T); A_i = \frac{6\varepsilon_i}{d_i \phi_i}; x_o = C_o / C$$

$$\eta = 3/\phi; \phi = r_0 \left(\frac{SR_s}{D_p} \right)^{1/2}$$

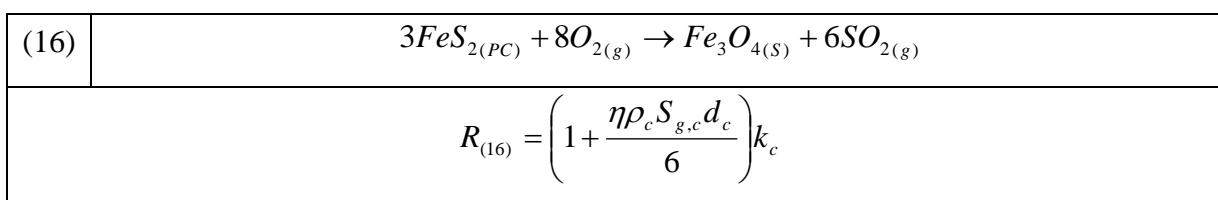
Onde r₀ é o raio inicial da partícula, S é a área superficial, M_c é o peso molecular do carvão e A_e a área superficial externa da partícula, η fator de eficiência.

Os modelos para o consumo de pirrotita Fe_{0,877}S foi deduzido a partir dos modelos de (BOOL et al., 1995) e pode ser visto no equacionamento abaixo e foi modelado como uma reação de primeira ordem:

(15)	$Fe_{0,877}S_{(PC)} + O_{2(g)} \rightarrow Fe_3O_{4(S)} + SO_{2(g)}$
$R_{(15)} = k_0 S_p \left(\frac{P_{O_2}}{RT_g} \right)$	

$$k_0 = k_{(15)} \left(\frac{PM_{O_2}}{PM_{Fe_2O_3}} \right); k_{(15)} = 5 \times 10^9 \exp(-150000 / RT_p)$$

O modelo a seguir apresentado demonstra uma simplificação do mecanismo de consumo da pirita proposto por (MITCHELL, 2002), o qual é uma simplificação da transformação da pirita, que segue as seguintes transformações $FeS_2 \rightarrow FeS \rightarrow FeO \rightarrow Fe_3O_4 \rightarrow Fe_2O_3$.



$$K_c = 55 \exp(-20141/T); \eta = 0,1$$

3.3- Propriedades das Fases

Esta seção é destinada a demonstração dos métodos de cálculo das propriedades físicas das fases.

3.3.1- Propriedades do Gás

Densidade do gás é calculada usando um modelo que segue as leis dos gases ideais.

$$\rho_g = \frac{P_g}{RT_g} \sum \omega_{j,g} M_j \quad (3.7)$$

Onde, j são as espécies gasosas.

Viscosidades para componentes puros são calculadas a partir de teorias estatísticas pelas equações a seguir:

$$\mu_g = 2,6693 \times 10^{-6} \frac{1}{\Omega_{\mu,j}} \sqrt{\frac{M_j T_g}{\sigma_j}} \quad (3.8)$$

$$\Omega_j = \frac{1,16145}{(T^*)^{0,14874}} + \frac{0,52487}{\exp(0,77320T^*)} + \frac{2,16178}{\exp(2,4378T^*)} \quad (3.9)$$

$$T^* = \frac{k_{\text{Boltzmann}} T_g}{\epsilon_j} \quad (3.10)$$

As condutividades térmicas da substâncias puras são calculadas usando aproximação gasosa poliatômica de Eucken.

$$k_j = M_j \left(C_{p,j} + \frac{5R}{4M_j} \right) \quad (3.11)$$

A viscosidade da fase gasosa e as condutividades térmicas são calculadas usando método de Wilke.

$$\lambda_g = \sum_{j \in g} \left[\frac{\gamma_{j,g} \lambda_j}{\sum_{jj \in g} (\gamma_{jj,g} \chi_{j,jj})} \right] (\lambda = \mu, k); \quad \gamma_{j,g} = \frac{(\omega_{j,g} / M_j)}{\sum_{jj \in g} (\omega_{jj,g} / M_j)}; \quad (3.12)$$

$$\chi_{j,jj} = \left\{ 1 + (\lambda_j / \lambda_{jj}) (M_{jj} / M_j)^{1/4} \right\}^2$$

A difusividade binária das espécies gasosas é calculada pela equação abaixo:

$$D_{j,k}^T = 0,0018583 \times 10^{-4} \frac{T^{1/2} \sqrt{\left(\frac{1}{M_j}\right) + \left(\frac{1}{M_k}\right)}}{\left(P_g / 101325\right) \sigma_{ave}^2 \Omega_{ave}}; \sigma_{ave} = 0,5(\sigma_j + \sigma_k) \quad (3.13)$$

$$\Omega_{ave} = \frac{1,06036}{(T^*)^{0,15610}} + \frac{0,19300}{\exp(0,47635T^*)} + \frac{1,03587}{\exp(1,5299T^*)} + \frac{1,76474}{\exp(3,8941T^*)} \quad (3.14)$$

$$T^* = \frac{k_{\text{Boltzmann}} T_g}{\epsilon_{ave}}; \epsilon_{ave} = \sqrt{\epsilon_j \epsilon_k} \quad (3.15)$$

A temperatura do gás é definida pela equação a seguir:

$$H_g = \sum_{j \in g} \omega_{j,g} \left[\Delta H_{j,g}^{298K} + \int_{298K}^{T_g} C_{p,j}(T) dT \right] \quad (3.16)$$

$$C_{p,j}(T) = a_j + b_j T + c_j T^{-2} \quad (3.17)$$

A condutividade térmica efetiva é calculada baseada no método de Ligny como segue:

$$\frac{1}{Pe_{g-s,d}} = \frac{C_{1,d}}{Re_{g-s} Pr_g} + \frac{C_{2,d}}{1 + \frac{C_{3,d}}{Re_{g-s} Pr_g}} \quad (3.18)$$

$$Pe_{g-s,d} = \frac{d_s \varphi_s |\vec{U}_g - \vec{U}_s| (\rho_g C_{p,g})}{k_{g,d}^*} \quad (3.19)$$

Os coeficientes de transferência axial e radial as equações de entalpia são dados por:

$$\Gamma_{H_g,z} = \frac{\Delta W k_{g,1}^* + \Delta V k_{g,2}^*}{\sqrt{\Delta W^2 + \Delta V^2}}; \Gamma_{H_g,r} = \frac{\Delta W k_{g,2}^* + \Delta V k_{g,1}^*}{\sqrt{\Delta W^2 + \Delta V^2}} \quad (3.20)$$

Onde ΔW e ΔV são as diferença de velocidade entre o gás e carvão pulverizado para as direções radiais e verticais, no entanto, são considerados apenas com a presença de sólidos graúdos, como exemplo o coque. Todo o equacionamento aqui apresentado pode ser visto mais detalhado no trabalho de CASTRO, (2000).

3.3.2- Propriedades do Carvão Pulverizado

O fator de forma é assumido como sendo unitário, devido as partículas terem sido consideradas esféricas, a densidade aparente, a condutividade térmica e o diâmetro são variáveis assumidas como tendo valores constantes. A capacidade térmica e a temperatura são calculadas conforme equações demonstradas a seguir. A capacidade térmica do componente puro é modelada pela temperatura polinomial como se segue:

$$C_{P,k} = a_k + b_k T_s + \frac{c_k}{T_s^2} \quad C_{P,s} = \sum_{k \in S} C_{P,k} \omega_{k,s} \quad (3.21)$$

A temperatura é calculada pela entalpia e composição do carvão pela equação abaixo:

$$H_s = \sum_{k \in S} \omega_k \left[\Delta H_k^{298K} + \int_{298K}^{T_s} C_{P,k}(T) dT \right] \quad (3.22)$$

A condutividade do carvão pulverizado é modificada para considerar a radiação no interior do leito e a convecção na camada limite de acordo como modelado por CASTRO, (2000).

$$k_{s,\text{eff}} = (1 - \varepsilon_s)(k_g + a) + \varepsilon_s \left[\frac{2}{3k_s} + \left(\frac{k_g}{0.274} + b \right)^{-1} \right]^{-1} \quad (3.23)$$

$$a = \alpha \left[1 + \left(\frac{1 - \varepsilon_s}{\varepsilon_s} \right) \left(\frac{1 - e_s}{2e_s} \right) \right]^{-1} \quad (3.24)$$

$$b = \alpha \left(\frac{e_s}{2 - e_s} \right) \quad (3.25)$$

$$\alpha = 0.1952 d_s \left(\frac{T_s}{100} \right)^3 \left(\frac{4.184}{3600} \right) \quad (3.26)$$

O modelamento aqui apresentado foi desenvolvido a partir dos trabalhos de outros autores, os quais têm estudado a cinética da combustão do carvão e o comportamento do processo em alto-forno. A base deste trabalho, no entanto se encontra no trabalho de CASTRO, (2000) do qual foi extraído a maior parte do modelamento matemático e das equações apresentadas para as diferentes reações e suas taxas.

4- Resultados e Discussões

Este capítulo tem o objetivo de discutir os resultados obtidos através de simulações de condições experimentais retiradas da literatura. Tais condições foram implementadas no modelo, a fim de que este reproduzisse os resultados experimentais.

Os resultados experimentais serviram para a validação do modelo, tendo por finalidade a aferição dos resultados simulados, no intuito de assegurar a confiabilidade do modelo. A validação teve também o objetivo de ajustar parâmetros cinéticos das reações envolvidas, visto que os resultados esperados eram conhecidos.

Os valores experimentais utilizados nas simulações foram obtidos por (KHAIRIL et al., 2001), o qual tinha por objetivo a elucidação das reações do carvão a altas temperaturas. Os experimentos de KHAIRIL foram realizados para cinco tipos de carvão e variação de alguns parâmetros, tais como: a taxa de injeção de oxigênio, temperatura do ar aquecido, enriquecimento de O₂. Para a validação, portanto, serão utilizados dois resultados publicados para os carvões utilizados nos experimentos. Dados sobre esses carvões se encontram tabelados nas seções seguintes.

Os resultados da validação do modelo, bem como das demais simulações serão, então, analisados e discutidos nas seções a seguir. Estas seções tratarão de descrever o comportamento da combustão de carvão pulverizado no experimento e na simulação.

4.1- Validação do Modelo

As primeiras simulações feitas objetivaram a validação do modelo, como citado em seções anteriores e foram realizadas com dados das condições experimentais de acordo com o trabalho de KHAIRIL et al., (2001).

As propriedades dos carvões utilizados estão contidas na tabela 4.1.

Tabela 4.1: Propriedades dos carvões testados por KHAIRIL et al..

Carvões		A	B	C	D	E
Análise imediate (massa seca)	Cinzas	2,70	6,50	10,50	7,30	8,80
	Matéria volátil	41,20	34,00	18,90	34,80	26,30
	Carbono fixo	56,10	59,50	70,60	57,90	64,90
Razão de combustível		1,36	1,75	3,74	1,66	2,46
Análise elementar (%massa seca livre de cinzas)	C	75,10	83,80	88,40	84,47	85,01
	H	5,20	4,80	4,70	5,29	4,49
	N	1,50	2,20	0,80	7,87	7,99
Cinza (% massa na cinza como óxido)	SiO ₂	50,00	37,60	43,40	59,43	48,37
	Al ₂ O ₃	24,80	31,60	26,90	28,00	22,79
	Fe ₂ O ₃	16,70	3,60	9,10	7,86	6,40
	MgO	1,50	2,40	7,50	1,14	0,93
	CaO	1,80	10,60	1,30	1,29	1,05

Os parâmetros operacionais utilizados no experimento, tais como temperatura da Partícula e do gás, razão estequiométrica de O₂, concentração de O₂, velocidade da partícula e do gás, tempo de residência médio da partícula, de acordo com a referência acima, encontram-se na tabela 4.2 abaixo:

Tabela 4.2: Parâmetros usados no experimento por KHAIRIL et al. (2001).

	Temp. (K)	Veloc. (m/s)	Razão de O₂	Conc.O₂ (%)	Tempo de residência (s)
Gás	1300,1500	20	1.2;0,8	21	-
Carvão Pulverizado	300	10	-	-	0,01

Os ajustes dos parâmetros reacionais foram hierarquizados, para se obter uma metodologia para alteração dos valores. As reações da matéria volátil são as primeiras a serem variadas por ocorrerem primeiro. Posteriormente, ajusta-se as reações de combustão do carbono fixo, seguida da reação de “solution loss”. A reação de “water gas shift” não era alterada por se tratar de uma reação de equilíbrio, responsável por manter o equilíbrio entre as espécies carbono e hidrogênio e por ter parâmetros bem definidos no modelo.

A tabela 4.3 a seguir, mostra os valores adotados para a função de correção da cinética das Reações de combustão apresentadas no modelamento. Esses valores adotados são parâmetros, que multiplicam-se as equações de taxa reacionais apresentadas no capítulo de modelamento. A função de correção e os valores dos parâmetros podem então serem vistos na tabela abaixo.

Tabela 4.3: Valores Adotados para a função de correção da cinética das Reações de combustão apresentadas no modelamento.

$F(T) = A_0 T^n \text{EXP} \left[-\frac{A_1}{RT} \right]$			
Carvão A	A_0	n	A_1
$C(s) + \frac{1}{2}O_2(g) \rightarrow CO(g)$	0,003	0	12400
$C(s) + O_2(g) \rightarrow CO_2(g)$	0,003	0	12400
$\text{Volateis}(s) + \alpha_1 O_2(g) \rightarrow \alpha_2 CO_2(g) + \alpha_3 H_2O(g) + \alpha_4 N_2(g)$	25	0	12400
$\text{Volateis}(s) + \alpha_5 CO_2(g) \rightarrow \alpha_6 CO(g) + \alpha_7 H_2(g) + \alpha_8 N_2(g)$	25	0	12400
$C(s) + CO_2(g) \rightarrow 2CO(g)$	0,80	0	12400
Carvão B	A_0	n	A_1
$C(s) + \frac{1}{2}O_2(g) \rightarrow CO(g)$	0,003	0,18	5400
$C(s) + O_2(g) \rightarrow CO_2(g)$	0,00009	0,12	5300
$\text{Volateis}(s) + \alpha_1 O_2(g) \rightarrow \alpha_2 CO_2(g) + \alpha_3 H_2O(g) + \alpha_4 N_2(g)$	4	0,94	5200
$\text{Volateis}(s) + \alpha_5 CO_2(g) \rightarrow \alpha_6 CO(g) + \alpha_7 H_2(g) + \alpha_8 N_2(g)$	10	1,13	4000
$C(s) + CO_2(g) \rightarrow 2CO(g)$	0,005	0,15	7400

4.1.1- Carvão A

A tabela 4.4 abaixo mostra as condições de simulação aplicadas durante os ensaios para o carvão A. Os valores como fluxo de gás, velocidade, relação gás/carvão são calculados no modelo. Enquanto, os valores de temperatura de sopro diâmetro da partícula são dados de entrada para a simulação.

As condições de sopro deste experimento foram de 1.2, 21%, 1300K, para a razão estequiométrica, concentração de oxigênio e temperatura inicial do gás respectivamente, como pode ser visto na tabela 4.4 abaixo.

Tabela 4.4: Condições de simulação aplicadas nos ensaios para o carvão A.

Carvão A	Fluxo gasoso [Nm³/h]	Diametro de partícula [μm]	Velocidade [m/s]	Razão de O₂	Composição do gás de alimentação [% vol]	Temperatura de Sopro [K]	Relação gás / carvão [Nm³/kg carvão]
	86,7	72	18	1,2	O ₂ = 21 CO = 3,6 N ₂ = 75,4	1300	5,88

A temperatura da partícula atinge rapidamente valores acima de 2500K, porque inicialmente ocorre a devolatilização e combustão da matéria volátil, o que é contemplado no modelo através de duas reações uma endotérmica (que depende do teor de voláteis), pois é a quantidade de voláteis que determina os coeficientes estequiométricos dessas reações e outra exotérmica. Após à combustão de voláteis, ocorre as reações de combustão do carbono fixo, que pode ser total ou parcialmente queimados. A reação de “solution loss”, que consome carbono sendo fortemente endotérmica começa a ocorrer, devido a liberação de CO₂. Nesta região ocorre então liberação de CO e CO₂ e consumo de oxigênio e CO₂.

A figura 4.1 mostra resultados da simulação computacional da variação da temperatura da partícula e do gás. Os valores comparados com os valores medidos por (KHAIRIL et al., 2001), são os valores apenas da temperatura da partícula que foi verificada, fazendo uso de equipamento ótico para medida da temperatura instantânea.

Na figura 4.1 pode-se perceber que a temperatura calculada para a partícula e a temperatura da partícula medida no ensaio experimental apresentam uma boa concordância, visto que os valores calculados pelo modelo se aproximam dos valores experimentais.

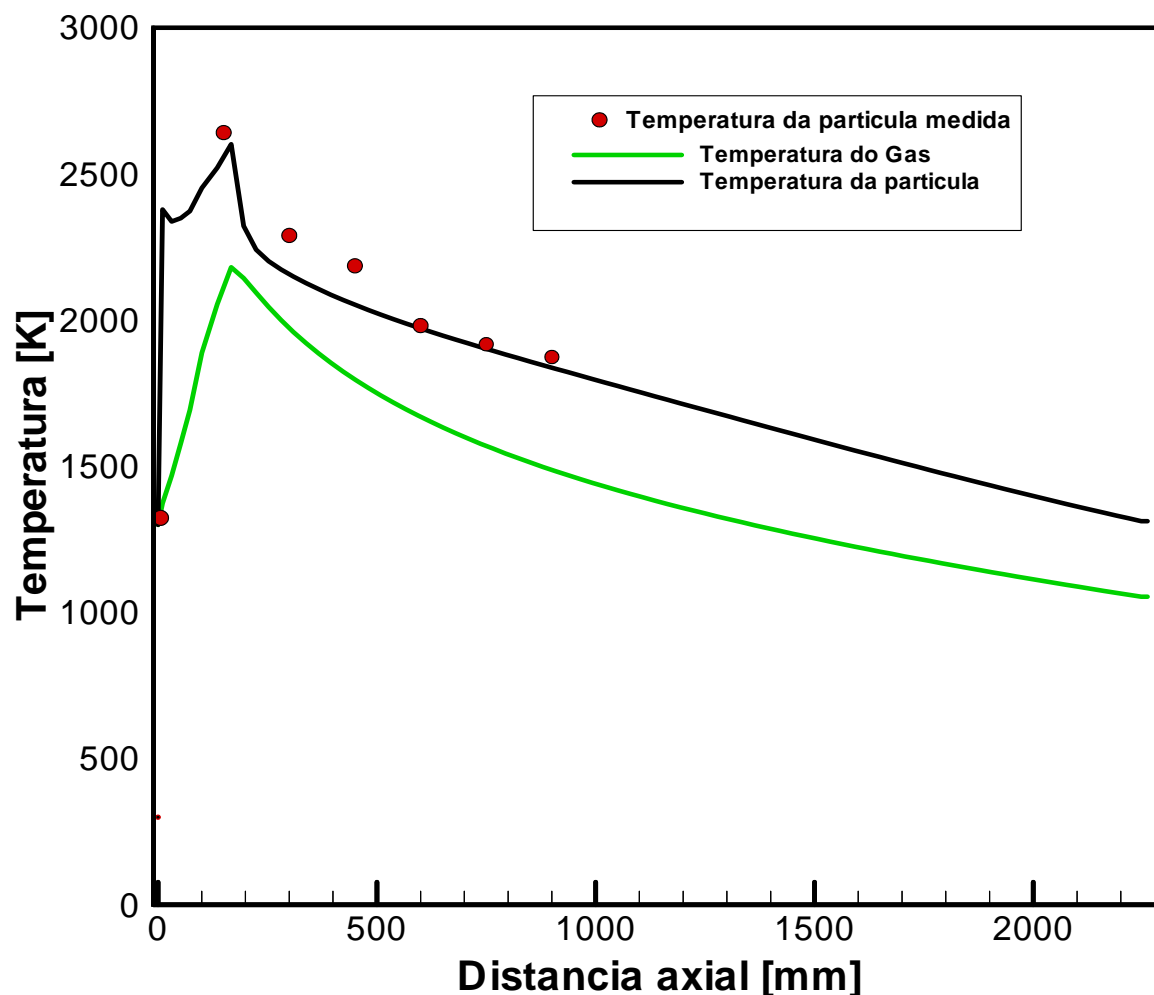


Figura 4.1: Gráfico da temperatura da partícula e do gás comparada com a temperatura da partícula obtida experimentalmente.

Na figura 4.2 abaixo apresenta-se as percentagens volumétricas dos gases gerados ao longo do reator tubular, conforme apresentado na seção do modelamento. Observa-se o consumo de oxigênio logo na entrada do reator devido às reações de volatilização e combustão, produzindo e consumindo simultaneamente CO e CO₂, H₂ e H₂O que tendem ao equilíbrio através da reação chamada “water gas shift”. Quando a temperatura decresce abaixo de 2273K, a sílica começa a ser reduzida formando carбето de silício como um composto intermediário que libera SiO na fase gasosa.

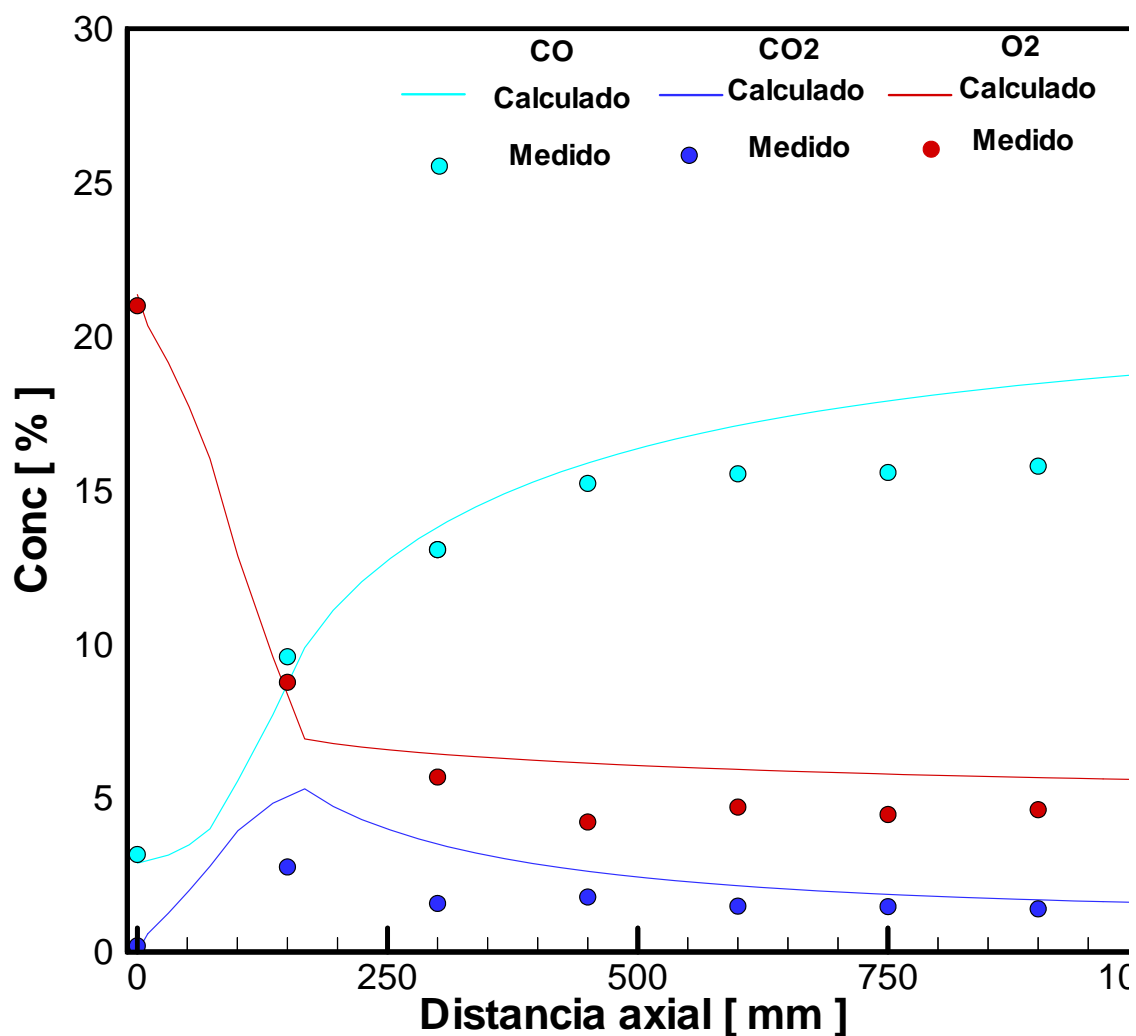


Figura 4.2: Gráfico da variação das concentrações de O₂, CO, CO₂ obtidos experimental e computacionalmente.

O comportamento dos componentes através do reator pode ser visualizado nas figuras a seguir, que representam o escoamento bidimensional das substâncias analisadas.

As figuras 4.3, 4.4 mostram como cada um dos gases, O₂, CO, CO₂ se distribuem dentro do reator. Nas figuras 4.5 e 4.6 pode-se ver a distribuição das temperaturas da partícula e do gás.

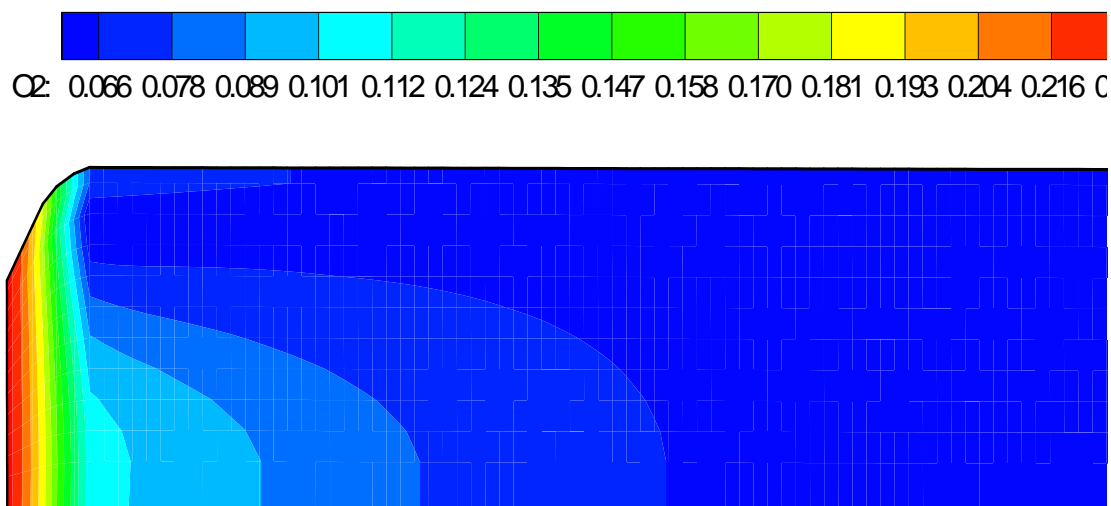
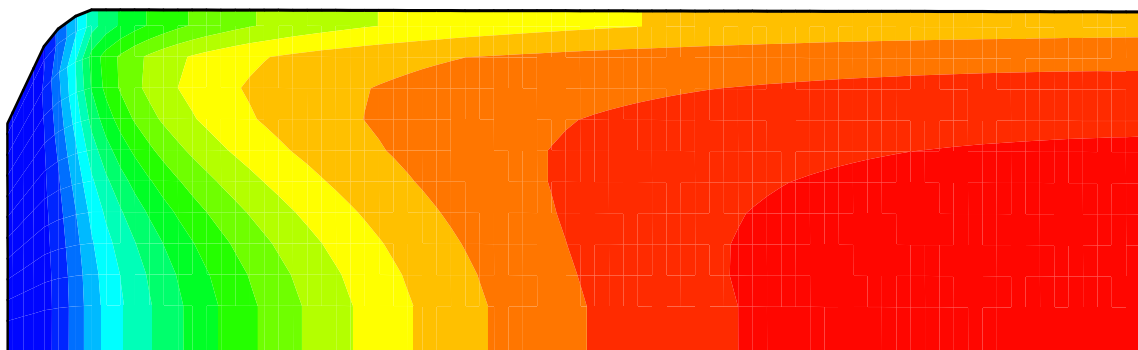
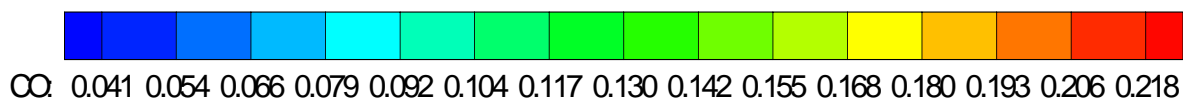
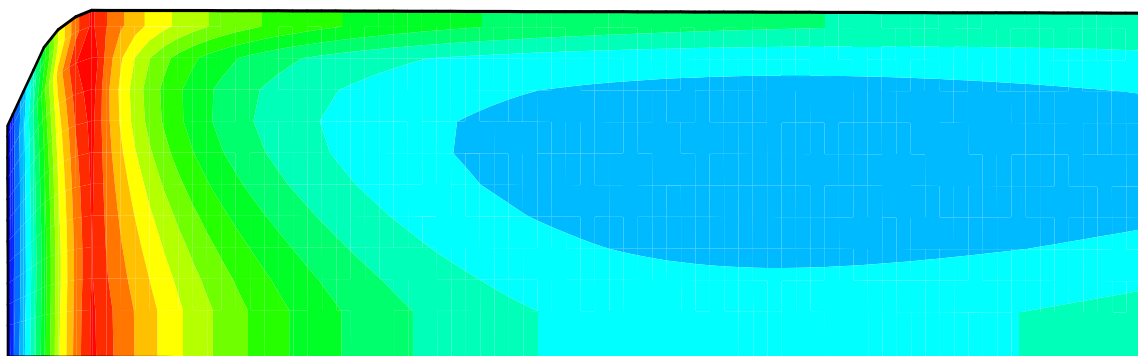
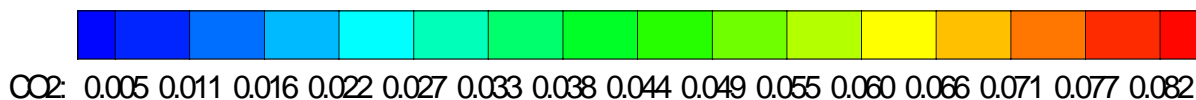


Figura 4.3: Comportamento do oxigênio, distribuição de O₂ no reator

Na figura 4.3 acima, pode se perceber que o O₂ é rapidamente consumido, devido as reações de combustão da matéria volátil e do carbono. O consumo de O₂ gera a liberação de CO e CO₂, que têm o comportamento plotado na figura a seguir, figura 4.4, a qual representa a distribuição axial desses componentes no reator. Pode se observar através da primeira figura 4.4 (a), que ocorre um aumento da concentração de CO a partir da região central do reator. Este fato pode ser explicado por uma maior ocorrência da reação de Boudouard (“solution Loss”) nesta região. Na figura 4.4 (b) pode ser observado na região central uma pequena concentração de CO₂. O dióxido de carbono é formado na região imediatamente após a entrada do reator o que pode ser explicado pelas reações de combustão da matéria volátil e do carbono. Com o aumento da temperatura, o CO₂ reage com carbono segundo a reação de Boudouard aumentando, conseqüentemente, a concentração de CO e diminuindo a temperatura do sistema, visto que esta reação é endotérmica e começa a ocorrer na faixa de 900°C.



(a)



(b)

Figura 4.4: Distribuição de CO (a) e CO₂ (b) através do reator.

As figuras 4.5, 4.6 representam a distribuição de temperatura da partícula e do gás respectivamente. De modo que se pode verificar onde ocorre uma maior perda de calor ou se há acúmulo em uma determinada região, favorecendo ou impedindo o prosseguimento das reações.

O aumento rápido da temperatura da partícula ocorre na região de entrada do reator, por causa da combustão da matéria volátil que é uma função

da temperatura do ar soprado. A temperatura da partícula tende a ser maior na região central do reator, porque é a região de maior acúmulo de partículas devido a injeção, ocorrência de reações exotérmicas no interior da partícula e menor perda de calor. A transferência de calor na região central ocorre da troca entre gás e partículas e entre as partículas por radiação. Na região mais próxima da parede e distante da entrada ocorre um menor acúmulo de partículas e troca de calor com ambiente pelas paredes do reator e, conseqüentemente menos reação química, fatos que explicam a menor temperatura desta região.

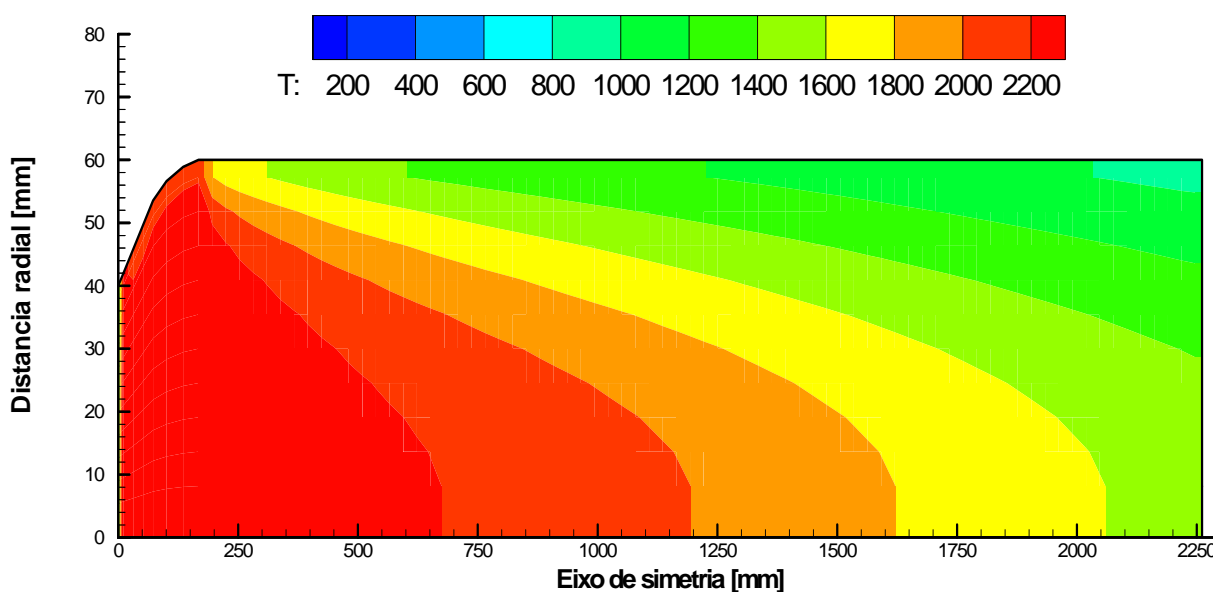


Figura 4.5: Distribuição da temperatura da partícula através do reator.

O perfil de temperatura do gás figura 4.6 abaixo, apresenta o comportamento do gás, que entra aquecido previamente no reator e tem sua temperatura aumentada na região central, devido a liberação dos gases de combustão nesta região. Porém, a temperatura do gás decai bastante próximo da parede, por causa da perda de calor pela parede, ocasionada pela refrigeração imposta para manter a integridade do refratário. A partir da

região mediana do reator a temperatura do gás diminui consideravelmente também por causa da reação de “solution loss”, que ocorre nesta região absorvendo calor do sistema.

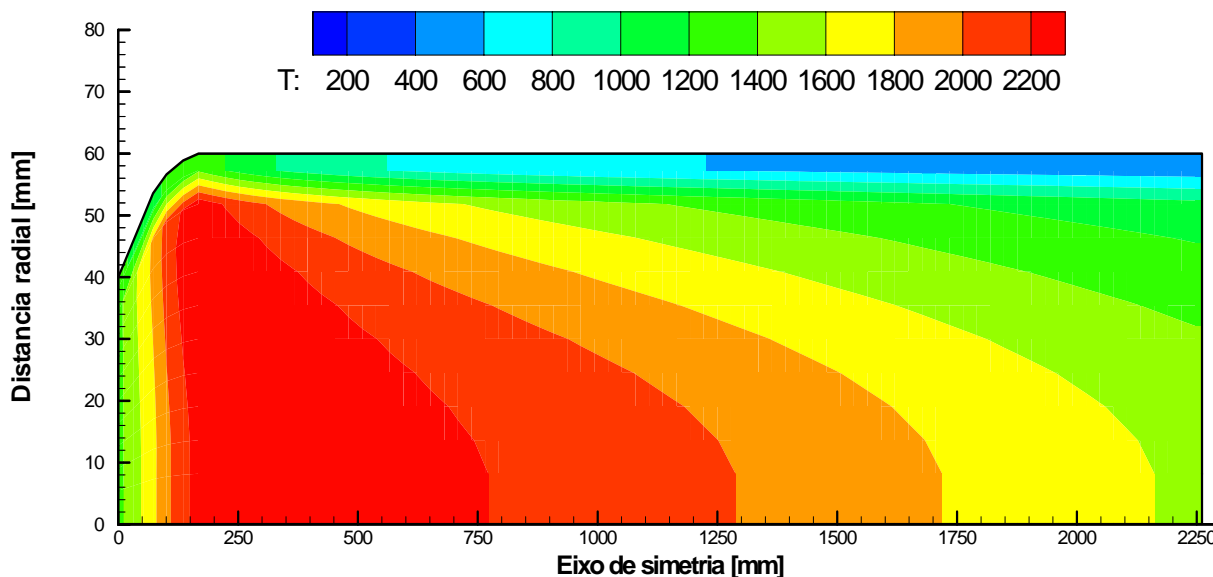


Figura 4.6: Distribuição da temperatura do gás através do reator.

4.1.2- Carvão B

Os resultados à seguir foram obtidos utilizando os dados composicionais do carvão B na tabela 4.1. As condições da simulação aplicadas ao ensaio podem ser vistas na tabela 4.5 abaixo. Os parâmetros apresentados na tabela 4.5 são semelhantes aos mencionados anteriormente para o carvão A, esses parâmetros apresentados, são calculados no modelo ou setados com dados de entrada, como por exemplo a temperatura de sopro e o diâmetro da partícula, que são dados de entrada do modelo.

Tabela 4.5: Condições de simulação aplicadas nos ensaios para o carvão B.

Carvão B	Fluxo gasoso [Nm ³ /h]	Diametro de partícula [μm]	Velocidade [m/s]	Razão de O ₂	Composição do gás de alimentação [% vol]	Temperatura de Sopro [K]	Relação gás / carvão [Nm ³ /kg carvão]
	90	72	20	1,2 e 0,8	O ₂ = 21 CO = 4,7 N ₂ = 74,3	1300	5,12

A figura 4.7 mostra a variação da composição dos gases no reator, explicitando como variam as concentrações de O₂, CO, CO₂ com o comprimento do reator.

Na figura 4.7 pode se observar que para um carvão médio volátil (carvão B) o comportamento do oxigênio permanece similar com a combustão de um carvão de alto volátil (carvão A). Podemos perceber pela curva que ocorre um decréscimo rápido no início do reator devido a devolatilização e logo após pela combustão do carbono fixo. É perceptível também, um aumento da concentração de CO e uma queda rápida da concentração de CO₂, por causa da reação de Boudouard que se inicia nesta região. Na figura 4.7 pode ser visto que a combustão do carvão, à partir de um certo comprimento do reator tende a manter-se constante. Este fato pode ser devido a uma menor quantidade de matéria-prima para reação prosseguir, perda de calor pelas paredes do reator que faz com que as reações diminuam, por causa da menor temperatura.

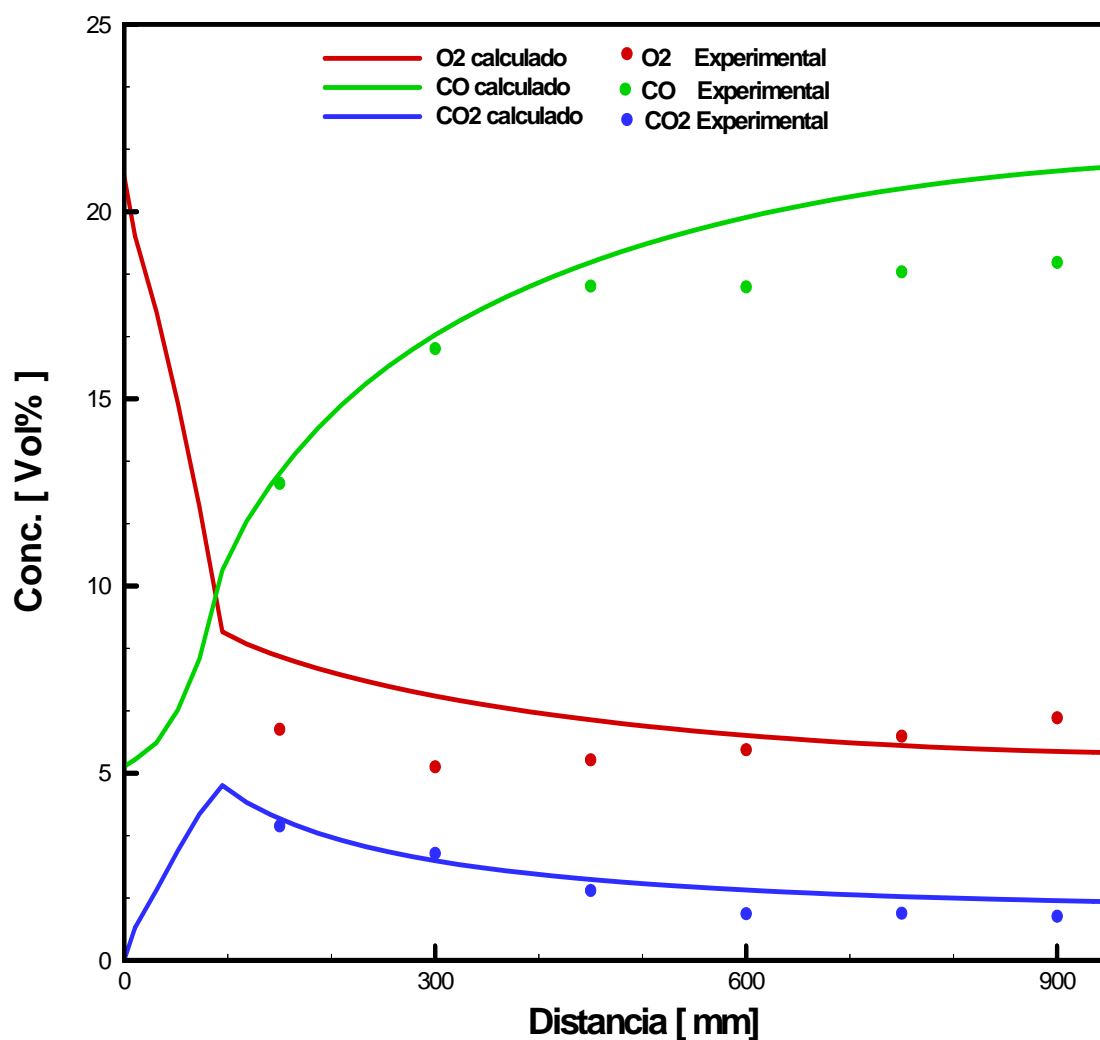


Figura 4.7: Comparação entre os dados experimentais e calculados para as composições de O₂, CO, CO₂ para o carvão B.

A figura 4.8 representa o escoamento do oxigênio pelo reator e mostra que este é consumido rapidamente na região de entrada do reator, pela devolatilização, combustão total e parcial da matéria carbonosa. O consumo do O₂, na entrada, faz que ocorra a liberação de monóxido e dióxido de carbono no reator aumentando a concentração destes nas regiões posteriores a entrada como pode ser visto nas figuras ilustrativas do comportamento desses gases.

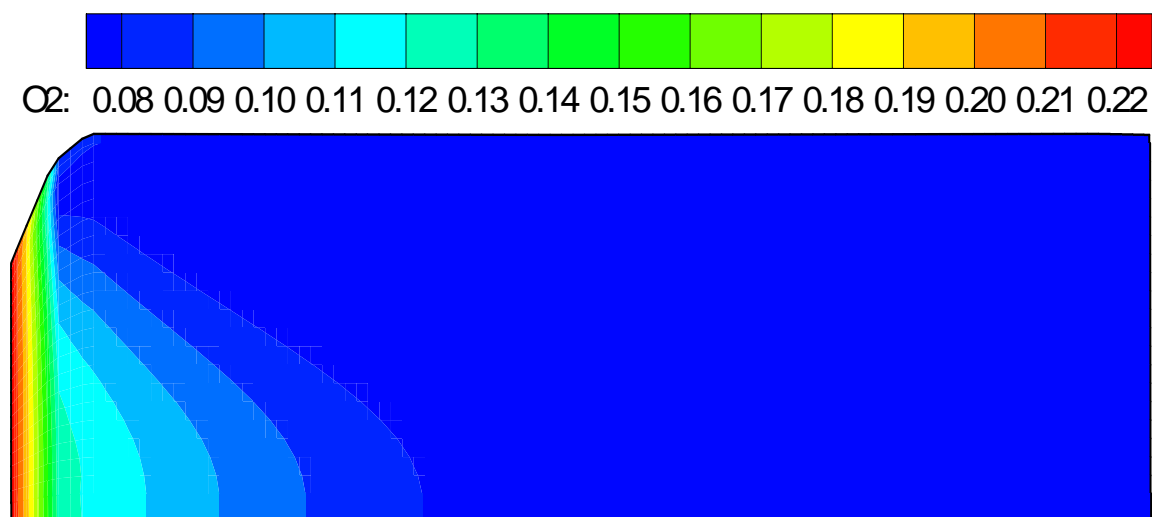


Figura 4.8: Comportamento do oxigênio, distribuição de O₂ no reator.

A figura 4.9 (a) e (b) representam o comportamento do CO e CO₂ respectivamente, onde pode-se visualizar um aumento do CO na região próxima da entrada do reator. O aumento do CO é causado pela reação de “solution loss”, devido a uma grande quantidade de CO₂ formada logo no início pela combustão total do carbono e pela devolatilização. Pode-se perceber que há uma diferença dos perfis do carvão A (alto volátil) e carvão B (médio volátil), isto provavelmente é explicado pela quantidade de matéria volátil no carvão que pode afetar o comportamento da combustão, fazendo que a estrutura do carvão não favoreça a difusão do oxigênio até os carbonos das camadas internas causando uma redução da combustão. Outro fato é o aumento do teor de carbono fixo, o qual pode estar queimando nesta região parcialmente aumentando, assim, a concentração de CO nesta região.

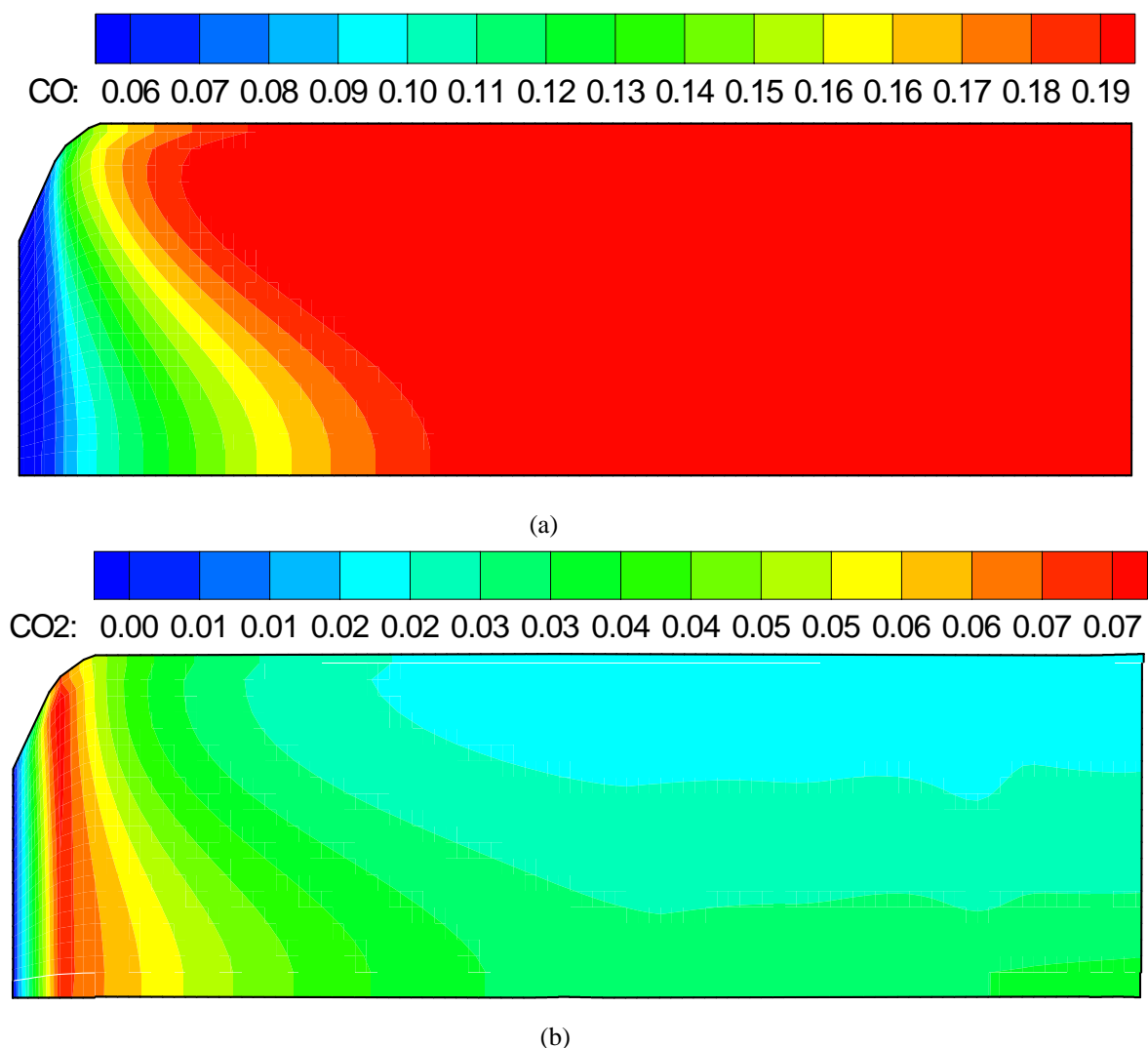


Figura 4.9: Distribuição de CO (a) e CO₂ (b) no reator.

As figuras 4.10, 4.11 referem-se respectivamente as temperaturas da partícula e do gás. A temperatura da partícula é elevada no começo do reator devido a devolatilização e reações exotérmicas em seu interior, que predominam nesta região. A temperatura do gás sofre um aumento na região de aproximadamente 150 mm, por causa da liberação de gases de combustão CO e CO₂. A temperatura do gás começa a decair a partir da região média do reator, devido a reação de “solution loss” que começa a ocorrer nesta região absorvendo calor e resfriando o sistema. O comportamento observado para um

carvão médio volátil (B) foi semelhante para um alto volátil mantendo-se as mesmas condições de operação para ambos.

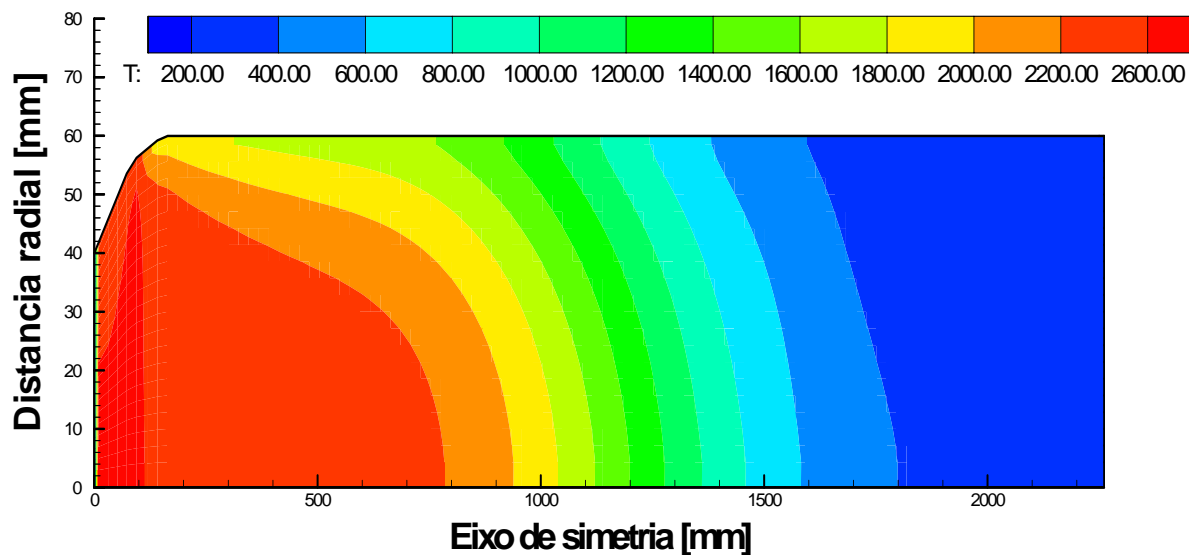


Figura 4.10: Distribuição da temperatura da partícula no reator.

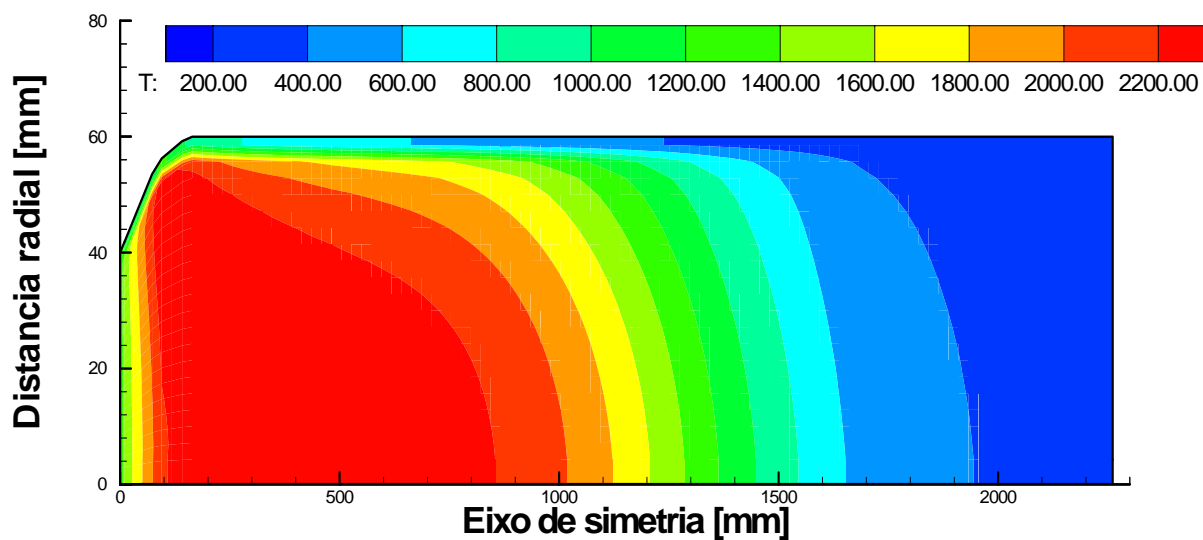


Figura 4.11: Distribuição da temperatura do gás no reator.

Os resultados apresentados a seguir foram simulados considerando as mesmas condições de sopro exceto para a razão estequiométrica de O₂ que foi de 0,8. A figura 4.12 mostra a variação na concentração dos gases O₂, CO,

CO₂. Esta variação foi realizada, com intuito de verificar a variação do comportamento prático do alto-forno, o qual na prática é normalmente operado com elevada taxa de alimentação de carvão (KHAIRIL et al., 2001).

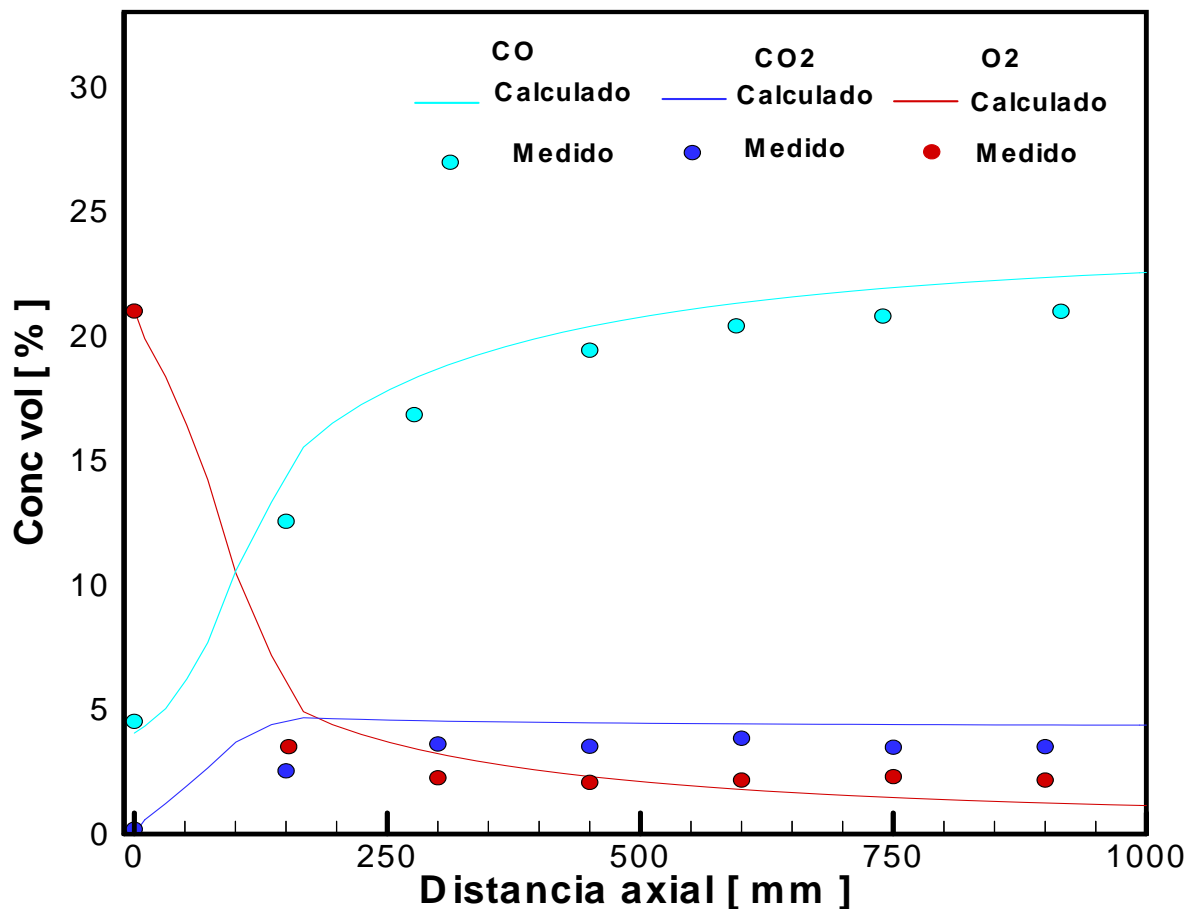


Figura 4.12: Comparação entre os dados experimentais e calculados para as composições dos gases O₂, CO, CO₂ carvão B com razão de O₂ de 0,8.

Na figura acima pode-se observar comportamento semelhante com os resultados das outras simulações, exceto para o CO₂, que apresenta-se com um valor constante. No entanto, cabe ressaltar que como a concentração de oxigênio era menor, a eficiência da combustão do carbono fixo foi menor que a observada nos resultados anteriores. O comportamento dos gases foram

semelhantes devido ao domínio das mesmas reações e a temperatura serem as mesmas. O comportamento do escoamento dos gases dentro do reator pode ser observado nas figuras a seguir. A figura 4.13 mostra o comportamento do oxigênio no reator, o qual é quase todo consumido logo no início, por causa das reações de devolatilização combustão da matéria volátil e do carbono fixo.

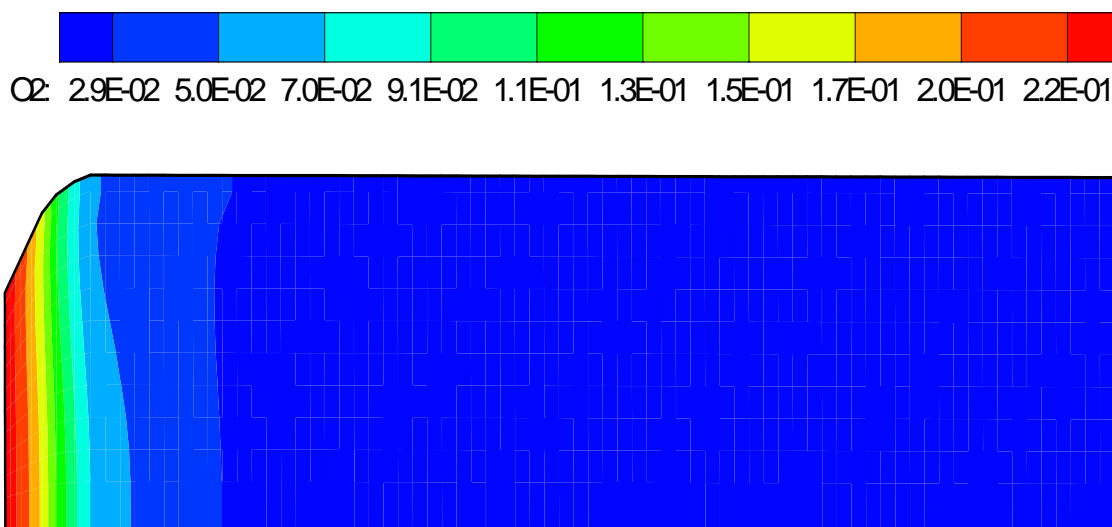
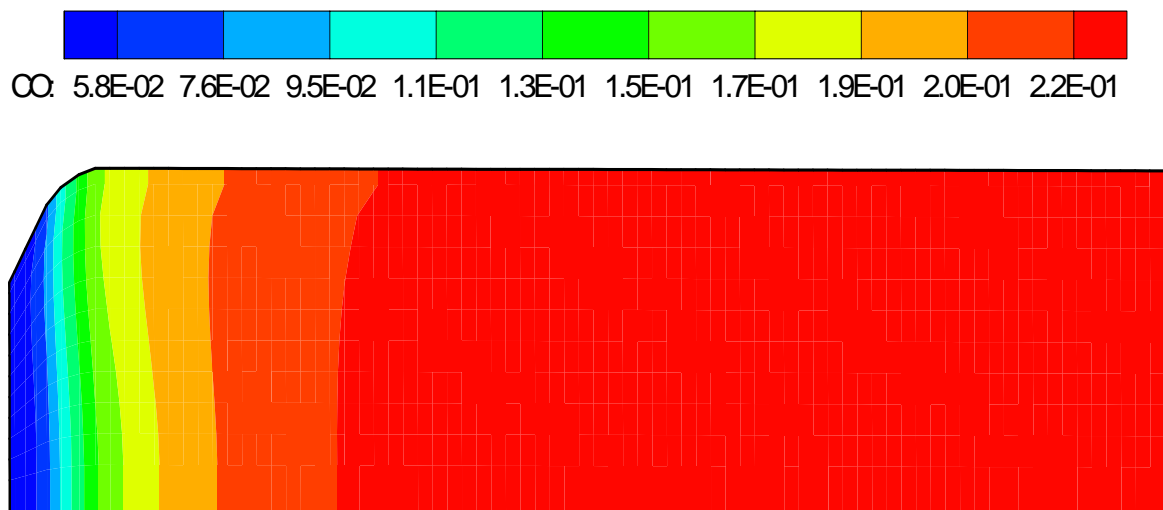


Figura 4.13: Comportamento do oxigênio, distribuição do O₂ no reator.

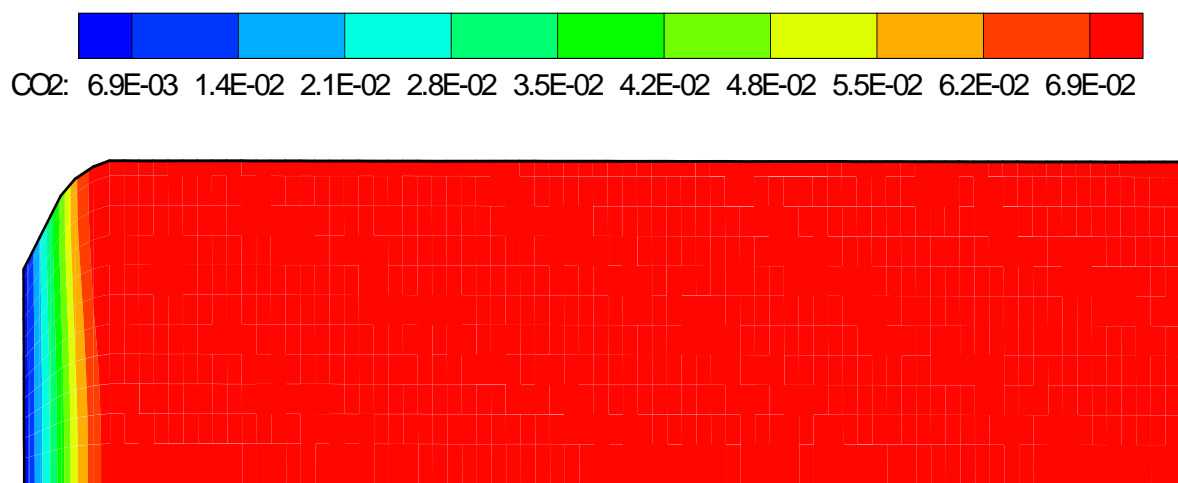
Nas figuras a seguir 4.14 (a) e (b) são mostradas o comportamento do escoamento do CO e CO₂ respectivamente. Observa-se pelas figuras que a concentração do CO aumenta logo no início fato este que pode ser explicado pela ocorrência de reações de combustão dos voláteis e carbono fixo queimando parcialmente. Este fato também pode ser atribuído a “solution loss” que consome parte do CO₂, diminuindo assim a concentração deste no meio, como a presença de combustão total é pequena as baixas concentrações de CO₂ não favorecem o consumo contínuo desta substância que se estabiliza. O perfil diferenciado do CO₂ pode, então, ser explicado pelo fato das reações de queima total ser menor pela falta de oxigênio e, como pouco dióxido de carbono é produzido as reações que o consomem não são favorecidas, daí sua

concentração manter-se constante. Outras reações que ocorrem aumentando a concentração de CO é a vaporização da umidade “water gas shift”, que também consome CO₂ e H₂ gerando CO e H₂O e equilibrando a quantidade de hidrogênio no meio reacional. Soma-se a este fato também as reações da sílica que produzem CO pela reação da sílica contido no carvão pulverizado com o carbono.

O Comportamento do SiO foi verificado para esta condição e pode ser visto na figura 4.15 abaixo. A redução da sílica é importante por se tratar de uma reação endotérmica, a qual pode causar um resfriamento na temperatura do escoamento. Pode ser visto no comportamento deste, que ocorre um aumento ligeiro em sua concentração próximo a saída do reator demonstrando que estas reações de redução da sílica são mais intensas na região final do reator.



(a)



(b)

Figura 4.14: Distribuição do CO (a) e CO₂ (b) no reator.

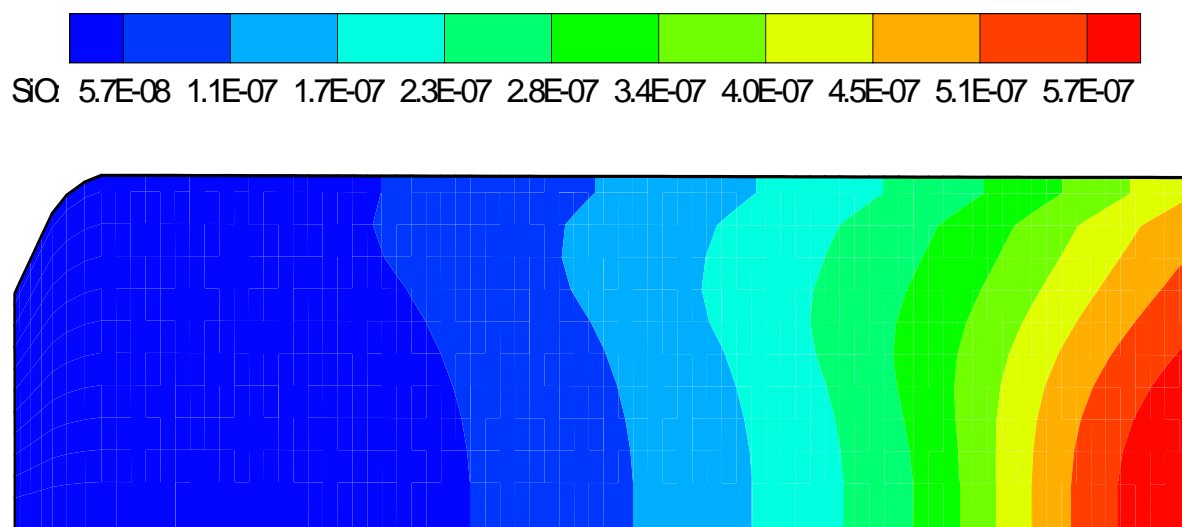


Figura 4.15: Distribuição do SiO no reator.

As figuras 4.16 e 4.17 representam o comportamento da temperatura da partícula e do gás respectivamente.

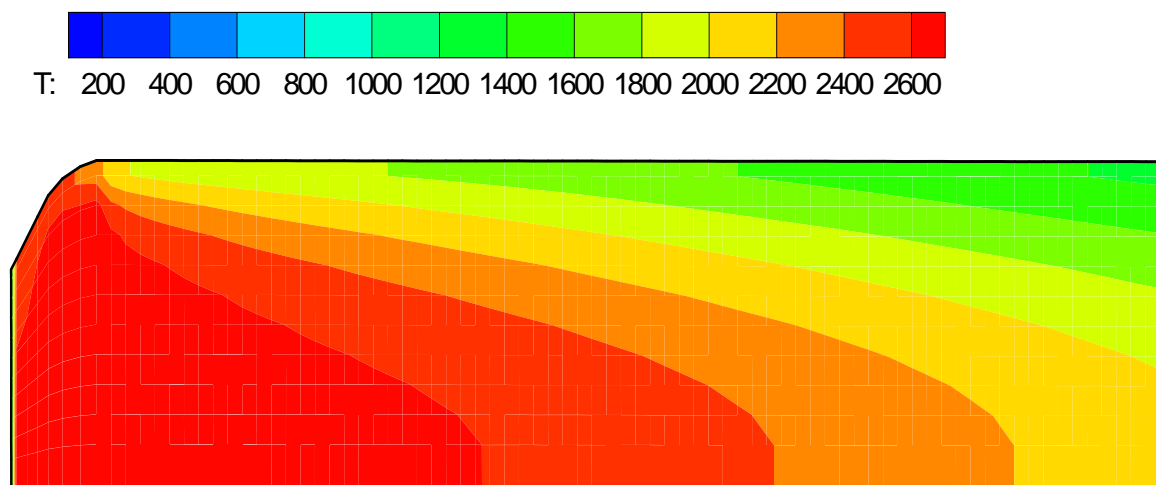


Figura 4.16: Distribuição da temperatura da partícula no reator.

A temperatura da partícula é aumentada na entrada do reator devido às reações de devolatilização e combustão que são predominantes nesta região e reações exotérmicas em seu interior. A temperatura da partícula tende a diminuir com o distanciamento da entrada do reator, por causa de um menor número de partículas diminuïrem a ocorrência das reações.

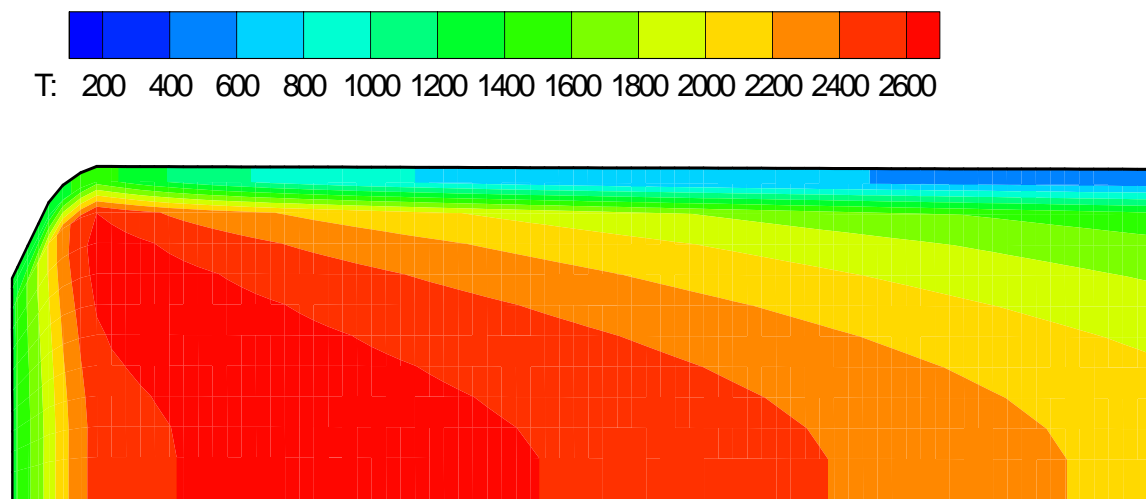


Figura 4.17: Distribuição da temperatura do gás no reator.

A temperatura do gás é maior na região posterior a entrada, pois nesta região ocorre a liberação dos gases da combustão dos voláteis e do carbono. Nas regiões próximas da parede pode-se observar uma redução considerável da temperatura do gás, pois ocorre um resfriamento para preservar o refratário do reator e por troca de calor com o ambiente.

As figuras seguintes 4.18, 4.19 ilustram o comportamento das principais reações ao longo do eixo do reator, onde podemos visualizar a taxa das reações. Na figura 4.18 observa-se que as reações de combustão são mais intensas logo na entrada do reator, fato este que pode ser explicado pela temperatura de entrada do gás. A temperatura do gás favorece a devolatilização que expõe os sítios ativos do carvão favorecendo, assim, a difusão do gás até o carbono no interior da partícula.

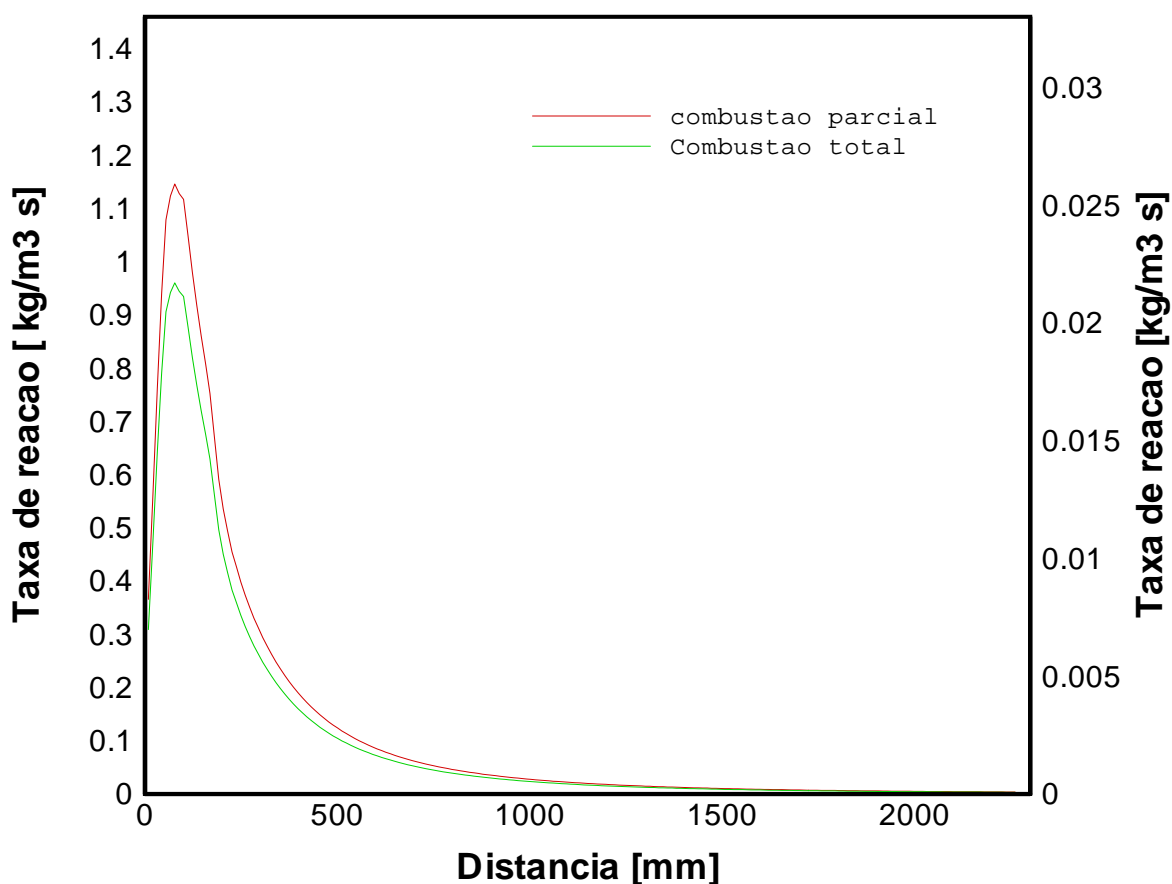


Figura 4.18: Comportamento das reações de combustão parcial e total.

A figura 4.19 mostra o comportamento das reações de “solution loss” e da combustão da matéria volátil. Estas reações ocorrem já na entrada do reator por serem uma função da temperatura de sopro e da quantidade de matéria volátil e se comportam exo ou endotérmicamente de acordo com a quantidade de matéria volátil no carvão, que conforme o modelo apresentado definem os coeficientes estequiométricos das reações de devolatilização. As reações de “solution loss” dos voláteis são normalmente endotérmicas e ocorrem consumindo CO₂ e liberando CO no sistema.

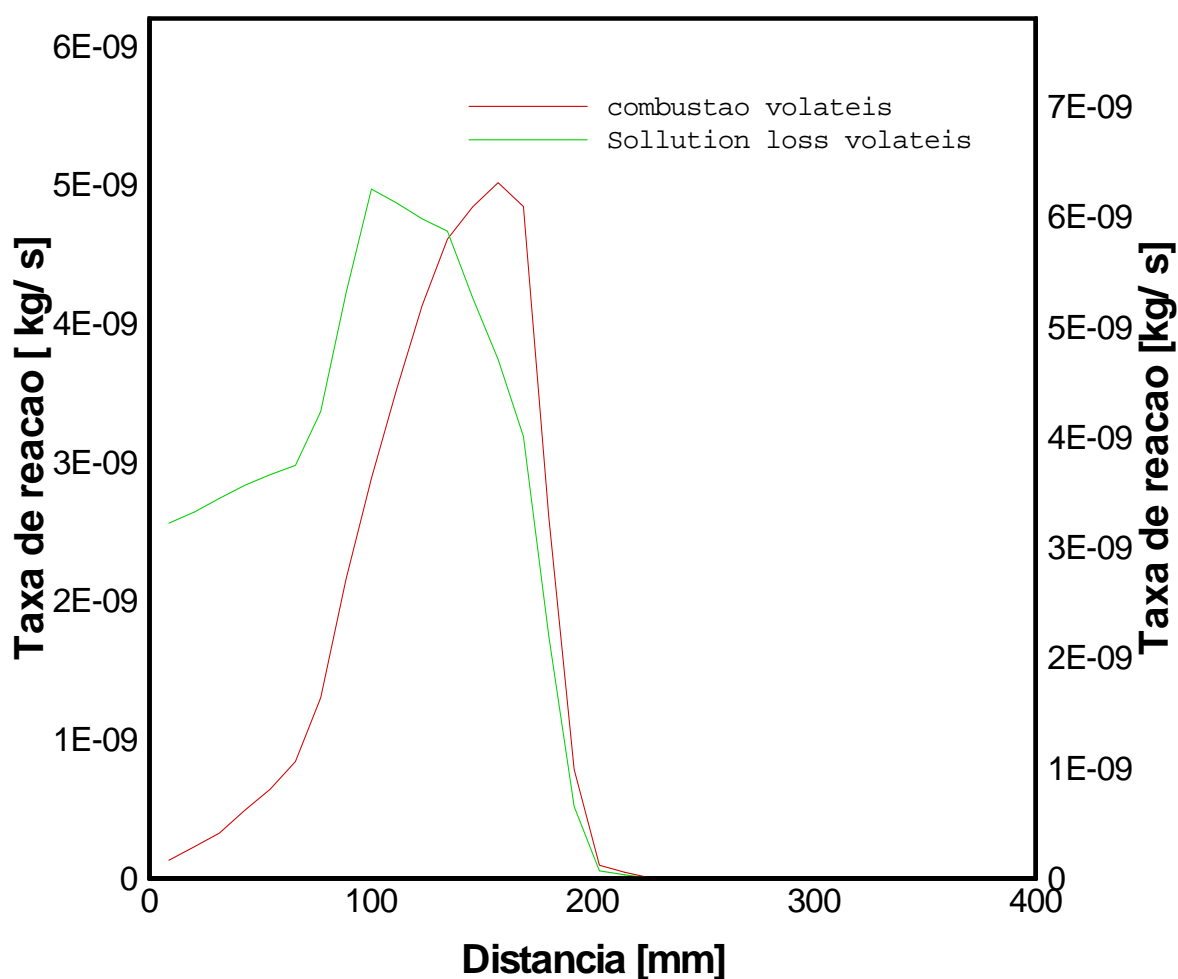


Figura 4.19: Comportamento das reações de combustão dos voláteis e “solution loss”.

4.2- Variação de Parâmetros no Modelo

Esta seção mostra resultados calculados introduzindo-se ao modelo variações em parâmetros, que são normalmente feitas no processo real do alto-forno. Estas variações têm por finalidade verificar não apenas como o modelo responde às condições próximas da realidade operacional, mas também a de verificar como os carvões testados respondem ao efeito da variação destes parâmetros. Os resultados apresentados utilizaram os dados composicionais de um carvão médio volátil (carvão B na tabela 4.1).

4.2.1- Influência do Teor de Matéria Volátil

A quantidade de matéria volátil é um importante parâmetro a ser estudado, pois relaciona-se diretamente às propriedades do carvão utilizado para queima. A figura 4.20 ilustra o comportamento da combustão com uma variação do teor de voláteis na composição do carvão.

Para a execução desta simulação a temperatura do gás e da partícula foram de 1300 e 300K respectivamente, a razão estequiométrica foi mantida constante a 1,0, e a concentração inicial de O₂ em 21% em volume. O teor de voláteis foi variado de 35 a 55% na composição do carvão.

Pela figura 4.20 pode ser observado um aumento na eficiência de queima do carvão de acordo com o aumento de voláteis. O Aumento da eficiência de combustão pode ser explicado pela exposição da superfície interna do carvão ao gás reagente, que tem sua difusão ao interior da partícula facilitada pela devolatilização, que produzem um grande número de sítios ativos como citado anteriormente na revisão bibliográfica, à partir dos trabalhos de LEE et al. (1991) e LIN et al. (1994). Soma-se a estas citações ainda o trabalho de HUTNY et al. (1991), que cita diversos fatores, dos quais dependem a eficiência da combustão e relaciona dentre estes fatores as

propriedades do carvão, onde a matéria volátil é um dos principais. A matéria volátil desempenha papel importante durante a combustão, pois de acordo com o trabalho de UENO et al. (1993), após a devolatilização a estrutura do carvão pode expor de duas formas diferentes a matéria carbonosa no interior da partícula, uma onde se forma glóbulos e não favorece a difusão do gás e outra onde vários canais reticulados expõe uma fina parede de carbono aumentando sua área superficial favorecendo a combustão. A eficiência da combustão, ou seja, a razão entre a quantidade de carvão reagido e a quantidade de entrada, está relacionada com a quantidade de matéria volátil, o que pode ser visto na figura 4.20 abaixo.

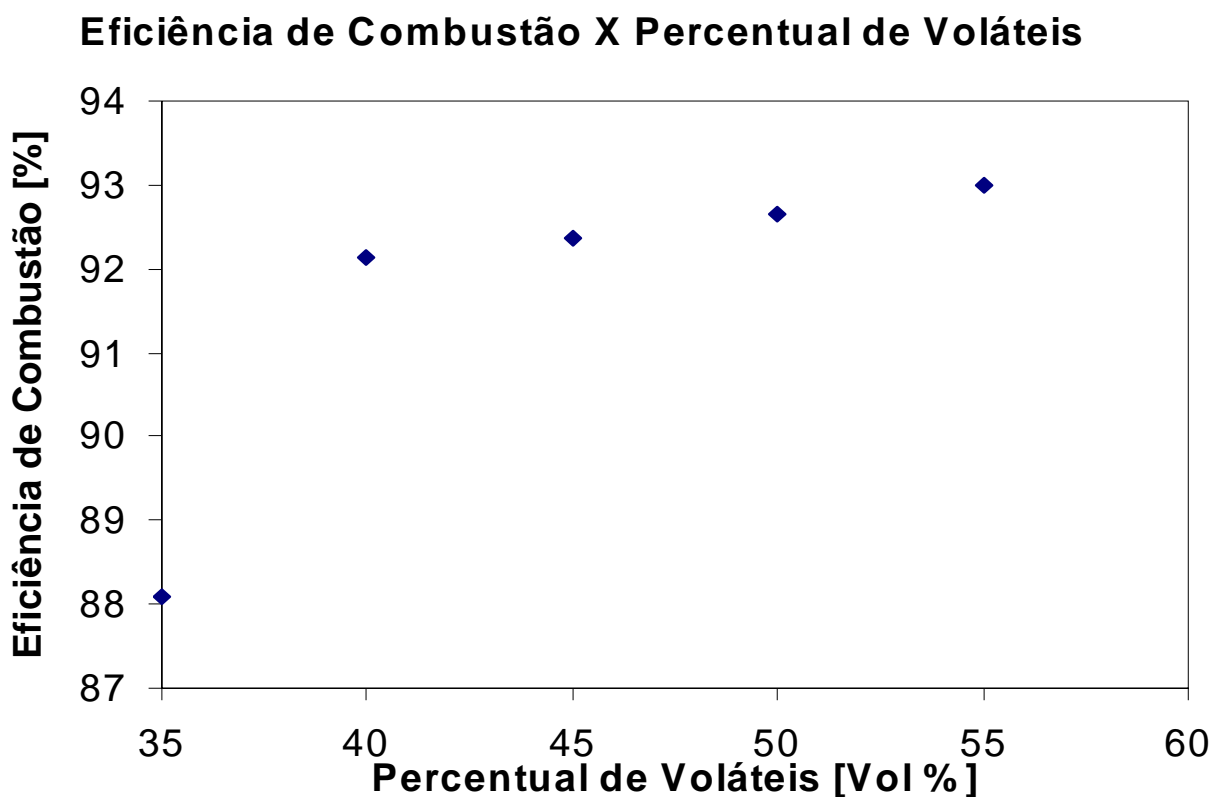


Figura 4.20: Gráfico da eficiência de combustão em função do percentual de voláteis no carvão.

4.2.2- Influência do Enriquecimento do Ar na Eficiência de Combustão

A figura 4.21 mostra a eficiência da combustão em função do enriquecimento do ar soprado no reator. Os parâmetros de temperatura do gás e da partícula, razão estequiométrica do oxigênio foram respectivamente de 1300 K, 300 K, 1,0, e a concentração de oxigênio varia de acordo com o enriquecimento. Pode-se perceber pela figura 4.21 que a eficiência da combustão é aumentada conforme a elevação do percentual de enriquecimento. O aumento da eficiência ocorre porque a presença de O₂ em excesso favorece a ocorrência das reações de combustão.

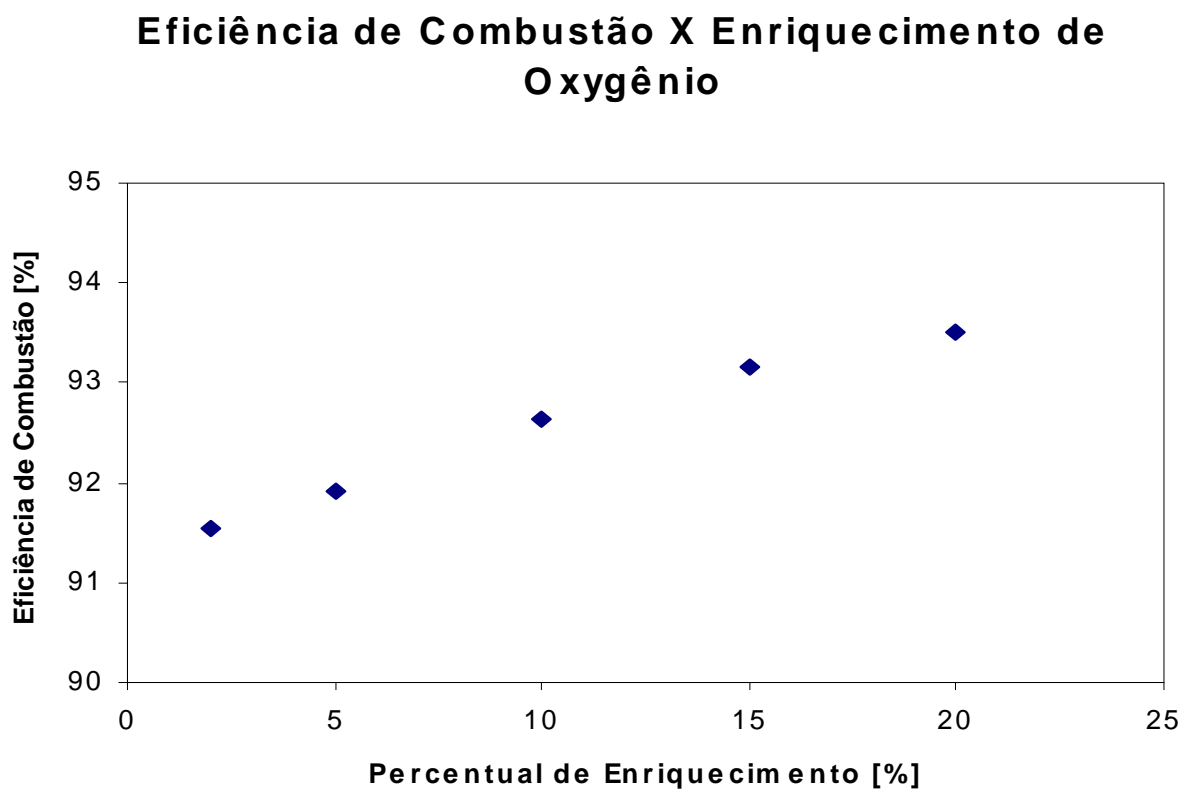


Figura 4.21: Eficiência da combustão em função do enriquecimento do sopro.

A figura 4.22 relaciona a variação da temperatura máxima da partícula com o enriquecimento do sopro, este fato pode ser explicado pelo aumento da concentração de oxigênio ocasionar um aumento das reações de combustão e devolatilização que liberam monóxido e dióxido de carbono ao meio elevando a temperatura do meio.

O enriquecimento demonstra que carvões com alguma qualidade pode ser queimado completamente, no entanto alguns carvões necessitam de mais oxigênio que outros. O enriquecimento feito com taxas moderadas, compensa a menor temperatura de chama ocasionada pela injeção e melhora o processo.

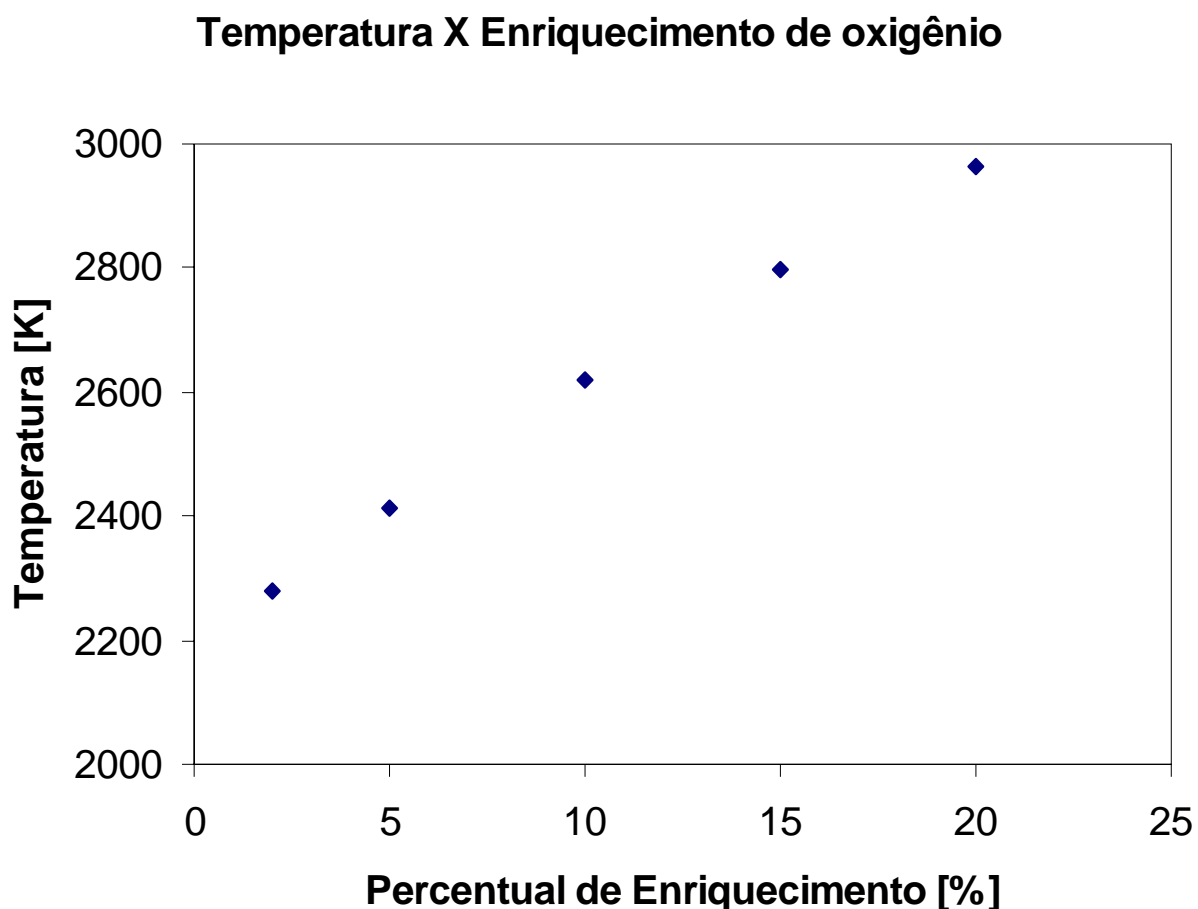


Figura 4.22: Variação na temperatura máxima da partícula em função do percentual de enriquecimento do sopro.

4.2.3- Simulação do Canal Adutor da Raceway

Os resultados apresentados nesta seção são uma extensão do modelo e têm por objetivo demonstrar o comportamento da injeção de carvão, considerando condições operacionais. A figura 4.23 trata-se da simulação da ventaneira de um alto-forno, onde pode-se ver a forma do canal adutor da raceway e o dimensionamento adotado para simular a injeção de carvão, a malha gerada por volumes finitos pode, então, ser vista na figura abaixo. O comportamento dos gases e das partículas são mostrados nas figuras seguintes, bem como a distribuição de temperatura das fases.

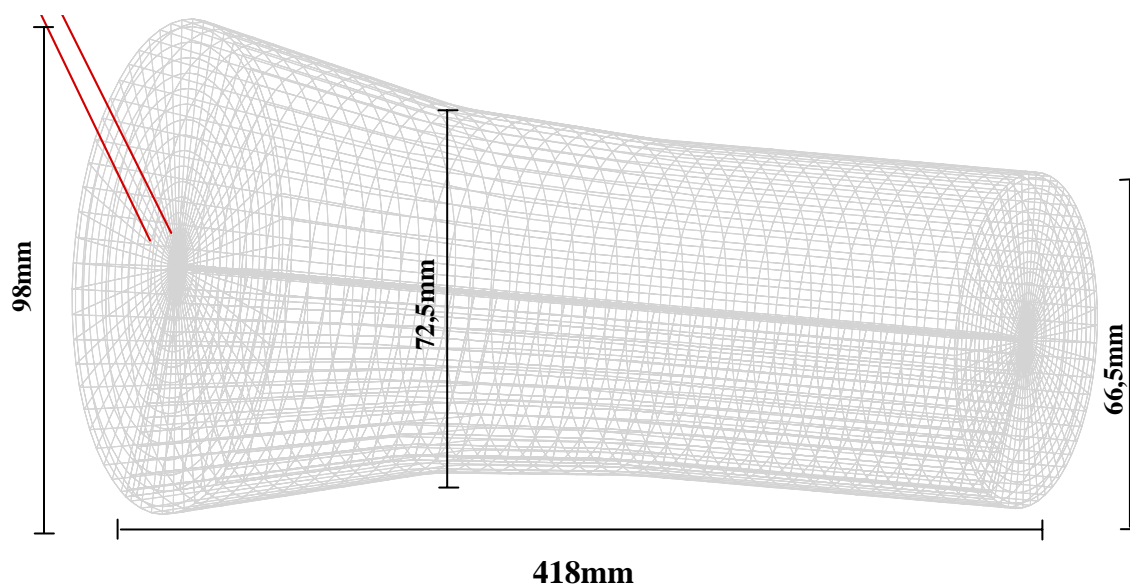


Figura 4.23: Grid mostrando a forma do canal adutor da raceway.

Na figura 4.24 a seguir pode ser visto o comportamento do oxigênio, que nesta região do alto-forno apresenta elevada concentração, devido ao fato desta região ser o local de sopro de ar para controle da temperatura e redução do forno. Na região das ventaneiras é onde ocorre também a injeção de carvão pulverizado que precisa ser consumido do processo. A elevada concentração

de O₂ faz com que o carvão tenha sua combustão iniciada logo na ponta da lança de injeção. Pode se perceber que a concentração de oxigênio decresce, consideravelmente, na região em frente a lança, por estar sendo consumido pelas reações de combustão, devolatilização, mas sofre um aumento na região fora da área atingida pela injeção de carvão. Este aumento da concentração é devido ao efeito de mistura e este oxigênio, será consumido posteriormente na raceway pela combustão do carbono fixo.

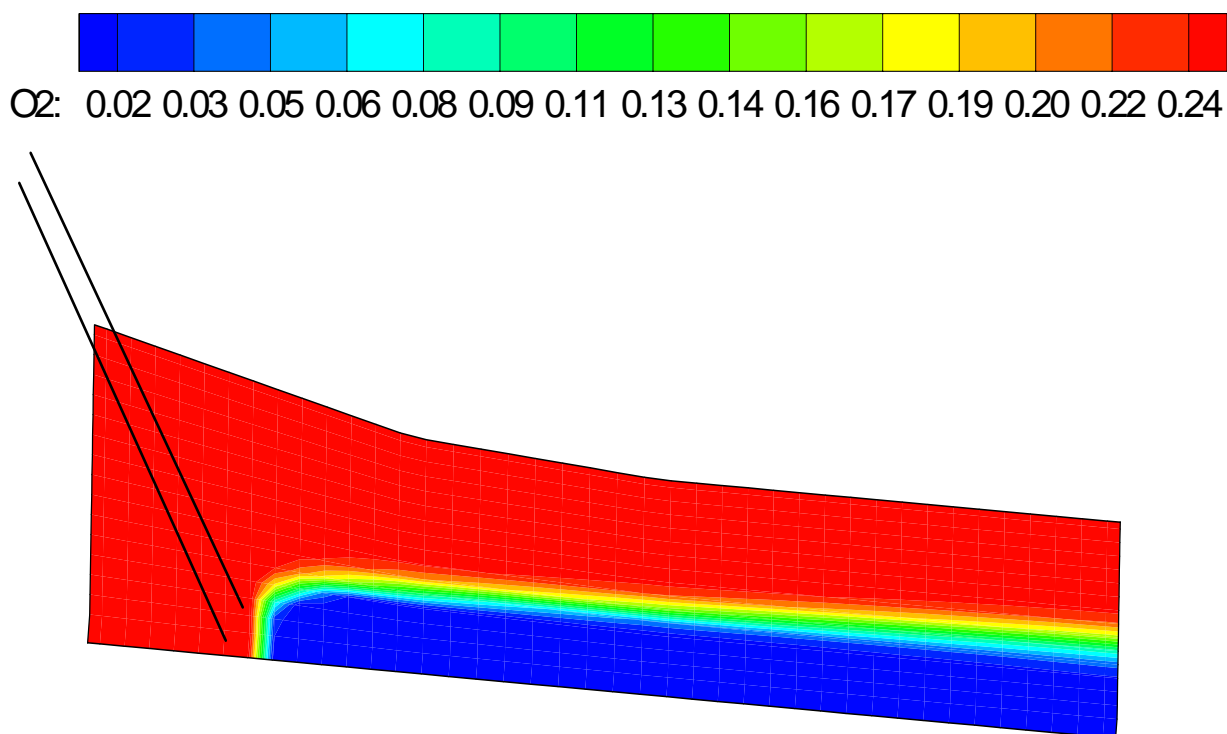
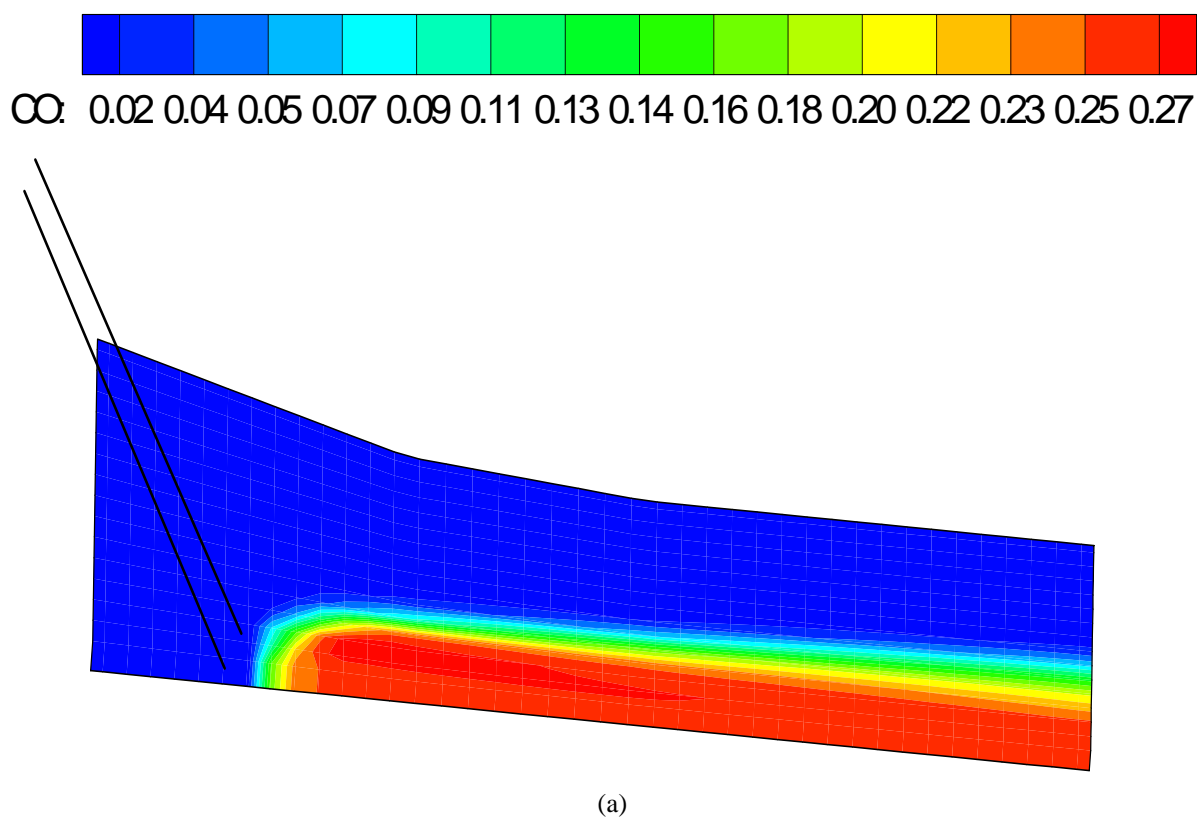


Figura 4.24: Distribuição do oxigênio no canal adutor da raceway.

O comportamento do CO na figura 4.25 (a) e do CO₂ pode ser visto na figura 4.25 (b) abaixo. Pode-se perceber na figura 4.25 (a) que a concentração do CO aumenta em regiões após o ponto de injeção o que pode ser explicado pela ocorrência da devolatilização e combustão parcial do carbono fixo e da matéria volátil que começam a liberar CO, e CO₂ por combustão total, ao

aumento do CO soma-se ainda o consumo de dióxido de carbono CO₂, por “solution loss”. Na figura 4.25 (b) é mostrado a distribuição do CO₂ que apresenta um ligeiro aumento na seção imediatamente após o ponto de injeção. O aumento da concentração de CO₂ é devido principalmente às reações da matéria volátil e combustão, no entanto esta concentração não continua se elevando porque ocorre a reação de Boudouard que consome CO₂ como já citado acima e é endotérmica o que não permite o aumento da temperatura do gás nesta região.



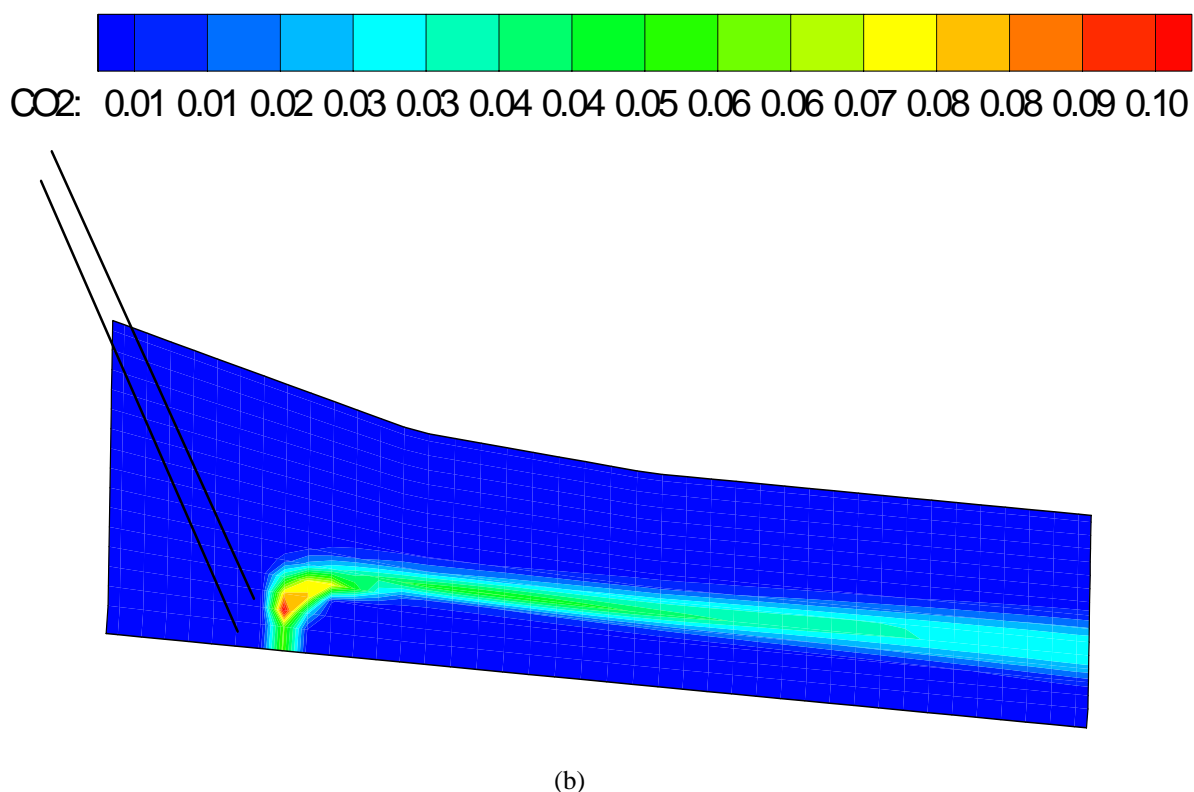


Figura 4.25: Distribuição do CO (a) e CO₂ (b) no canal adutor da raceway.

Na figura 4.26 é dada a distribuição da fração volumétrica do carvão, onde pode se verificar o comportamento deste no canal adutor, desde o ponto de injeção. A concentração de carvão é maior no ponto de injeção e, vai diminuindo, conforme a penetração deste na raceway a menor quantidade é devido a ocorrência de uma mistura com o ar o que faz com que o carvão esteja mais disperso por toda área do canal adutor. Esta dispersão faz com que a fração de finos à partir de um determinado ponto atinja uma estabilidade e praticamente não varie mais. Cabe ainda ressaltar, que embora a concentração maior de finos seja no ponto de injeção este não é queimado neste ponto, pois no ponto onde é injetado ocorre principalmente a devolatilização e combustão da matéria volátil, o carbono fixo será queimado apenas no interior da raceway juntamente com a matéria volátil que não foi consumida totalmente, pelo oxigênio como citado anteriormente.

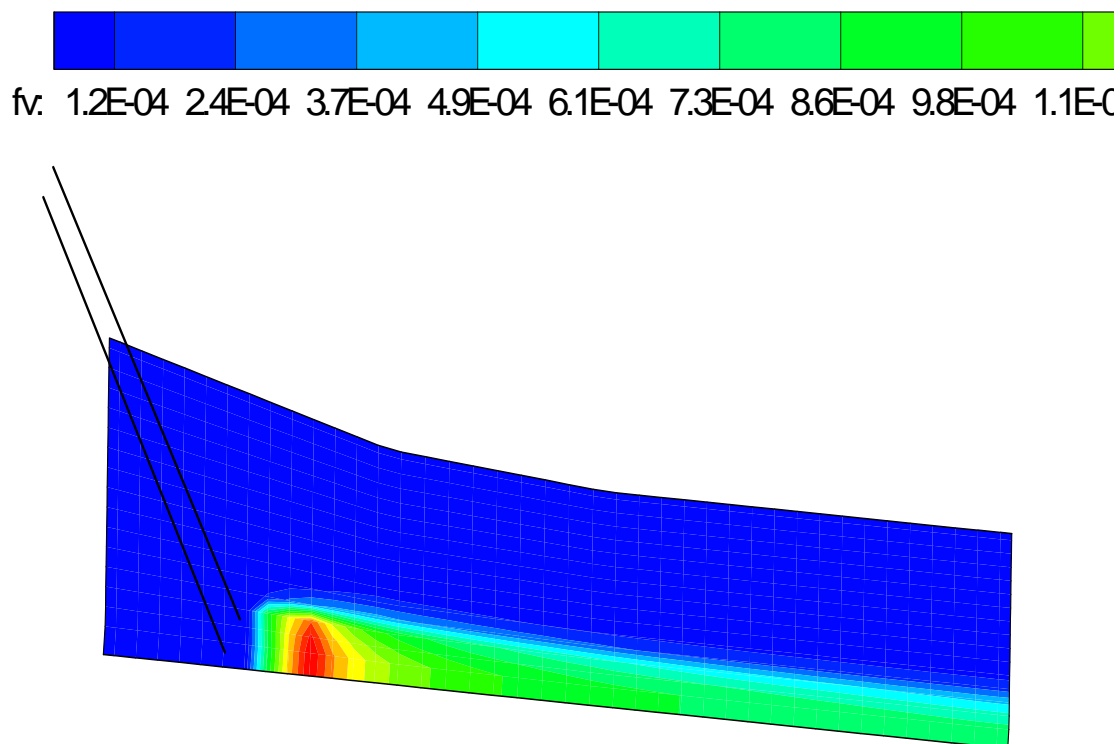


Figura 4.26: Distribuição do carvão no canal adutor da raceway.

Na figura 4.27 é mostrado o comportamento da temperatura do gás que sofre uma elevação, o qual já é soprado aquecido nas ventaneiras e a ocorrência de reações de combustão do carvão pulverizado, que liberam monóxido e dióxido de carbono no sistema. Estes fatos nesta região são decorrentes do sopro aquecido, que apresenta calor suficiente para começar a ignição do carvão no canal adutor em frente as ventaneiras. O regime térmico do alto-forno é, então, controlado pela temperatura na zona de combustão, a qual é normalmente referida como temperatura de chama adiabática da raceway. O perfil da temperatura apresentado aqui é diferente dos anteriormente vistos nas figuras 4.11 e 4.17 por exemplo, devido a questões como velocidade de sopro e de injeção, as quais anteriormente eram da ordem

de 20 e 10 m/s e nesta simulação atinge-se velocidade de sopro de aproximadamente 400m/s.

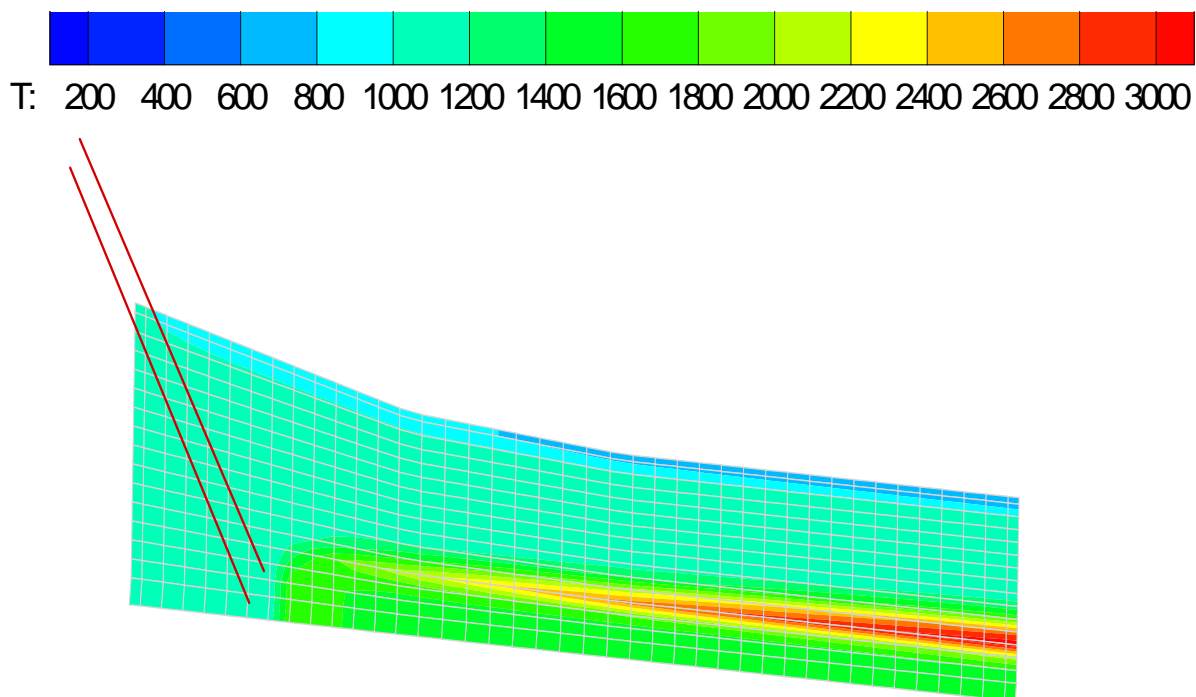


Figura 4.27: Distribuição da temperatura do gás no canal adutor da raceway.

Na figura 4.28 é mostrada a distribuição da temperatura da partícula, que aumenta devido a reações exotérmicas em seu interior, pela devolatilização e combustão. Isto pode ser verificado na figura abaixo, pois o aumento ocorre à partir do ponto de injeção, ponto onde ocorre o contato com ar aquecido e início das reações, estas favorecidas pela temperatura de sopro. O perfil aqui também é diferenciado das figuras anteriores 4.10 e 4.16, por causa da velocidade do sopro ser maior a combustão do carbono fixo não ocorrer tão intensamente nesta região e sim em regiões posteriores.

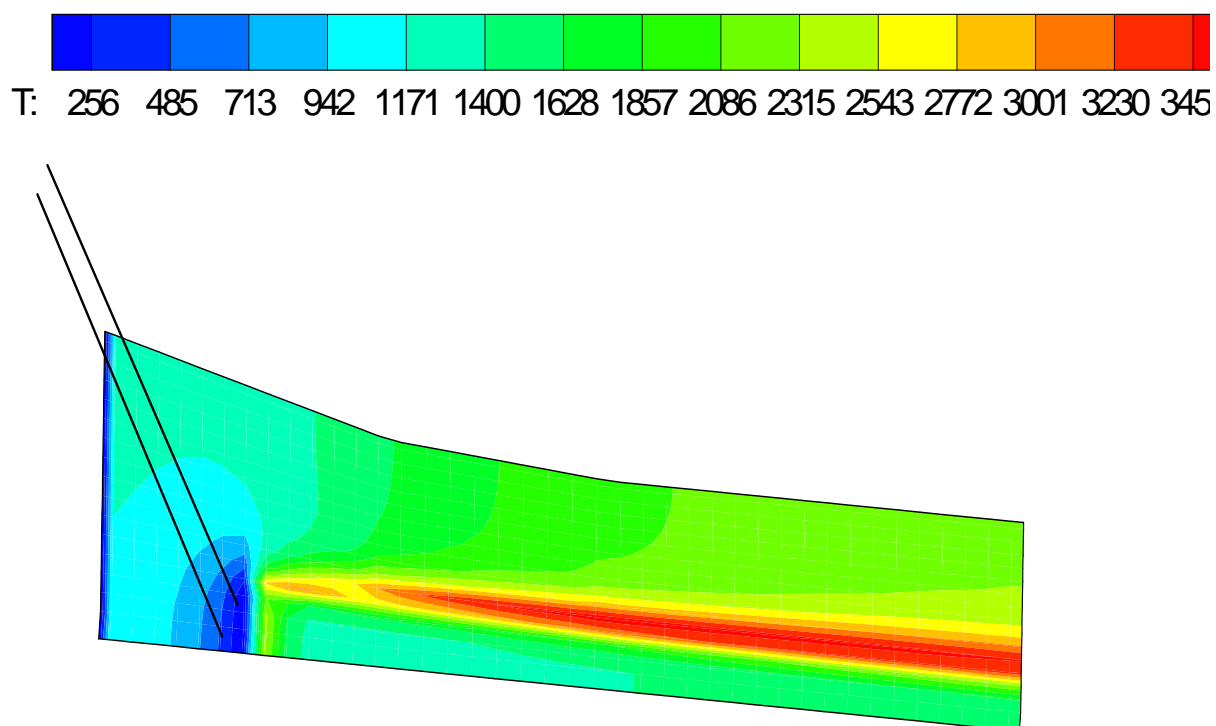


Figura 4.28: Distribuição da temperatura das partículas no canal adutor da raceway.

As figuras à seguir ilustram o comportamento de outras substâncias e Parâmetros que podem ser verificados no modelo.

A figura 4.29 mostra a distribuição dos voláteis, onde pode ser visto que ocorre um aumento na região imediatamente após o ponto de injeção, por causa da liberação dessas substâncias pelo contato com o sopro aquecido, porém são consumidas rapidamente em estágios posteriores.

A figura 4.30 abaixo mostra o comportamento do vapor d'água no reator, que sofre um aumento em frente a injeção de carvão e pode ser proveniente da umidade do carvão injetado, bem como de reações como a vaporização da umidade “water gas shift”, a qual libera H₂O no sistema.

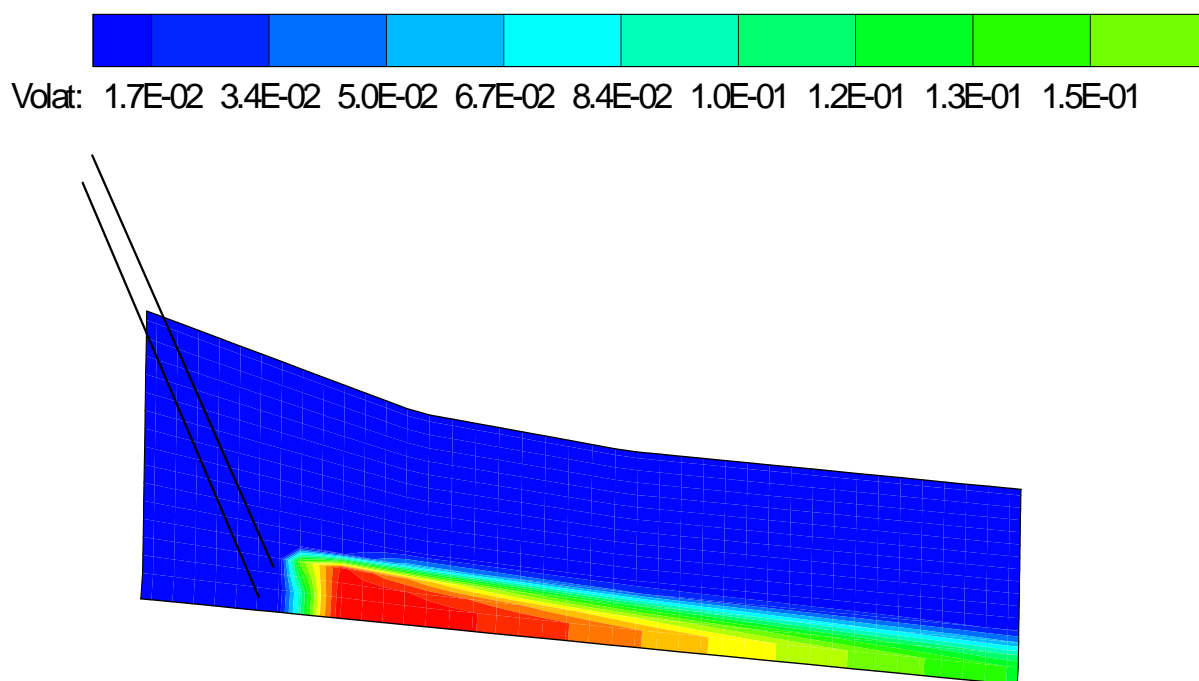


Figura 4.29: Distribuição dos voláteis no canal adutor da raceway.

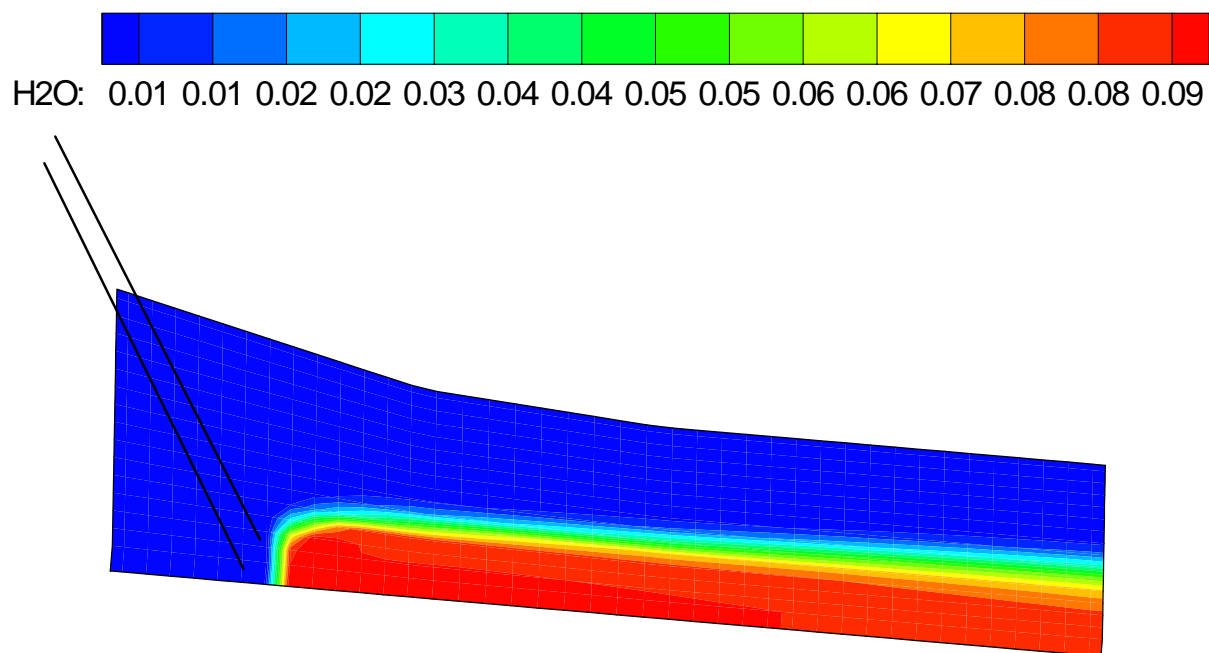
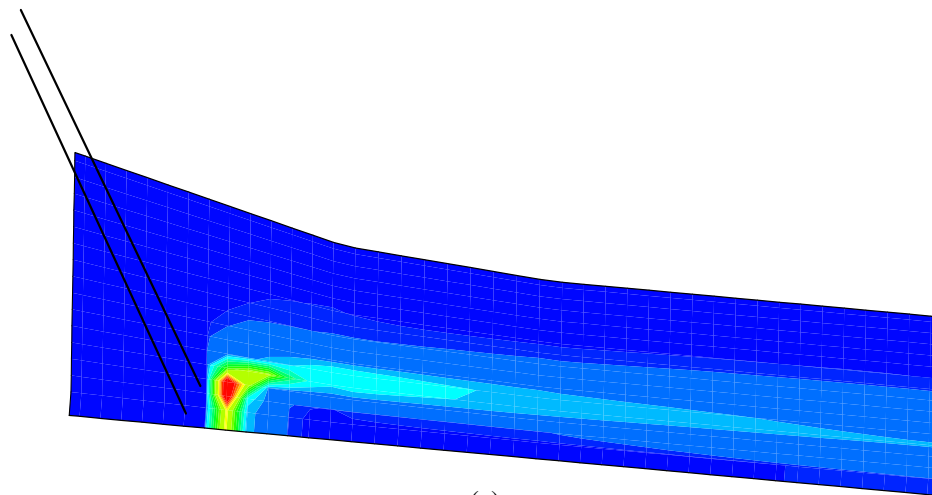


Figura 4.30: Distribuição do vapor d'água no canal adutor da raceway.

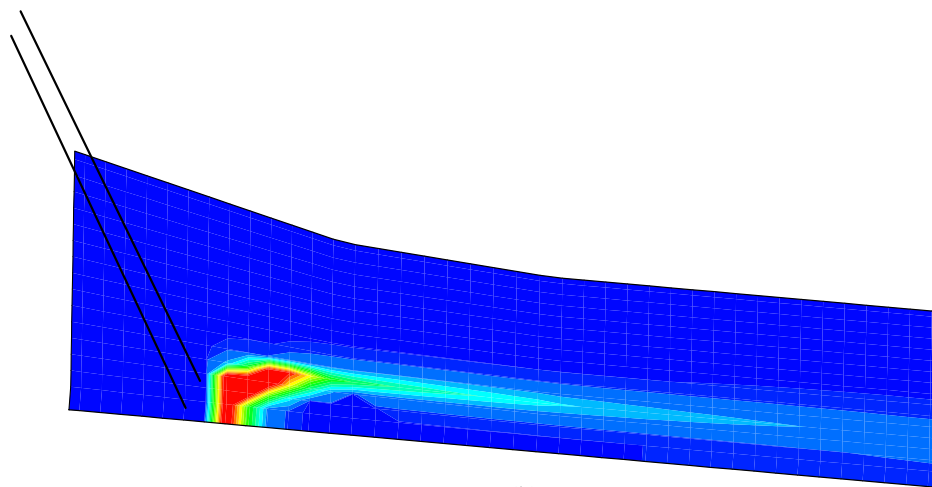
As figuras 4.31 (a) e (b) representam as reações de combustão e “solution loss” dos voláteis, que ocorrem mais intensamente na região próxima a ponta da lança de injeção, favorecida pela temperatura do sopro.

icvpc: 2.7E-11 1.6E-10 4.9E-08 1.3E-07 2.6E-07 3.9E-07 5.2E-07 6.5E-07 7.9E-07



(a)

ivspc: 1.7E-10 1.1E-08 1.3E-07 2.6E-07 3.9E-07 5.2E-07 6.5E-07 7.9E-07 9.2E-07



(b)

Figura 4.31: Comportamento das reações dos voláteis no canal adutor da raceway, combustão (a) e “solution loss”(b).

A figura 4.32 abaixo mostra o perfil de velocidade do gás desenvolvido na raceway, como ocorre um estreitamento no equipamento a velocidade aumenta de modo considerável nesta região. Próximo a parede ocorre uma menor velocidade, por que sofre resistência ao escoamento por causa do atrito com a parede. Na região central a velocidade desenvolvida é um pouco menor, por causa da injeção de carvão, fato este que causa um aumento da densidade do fluido reduzindo a velocidade do escoamento.

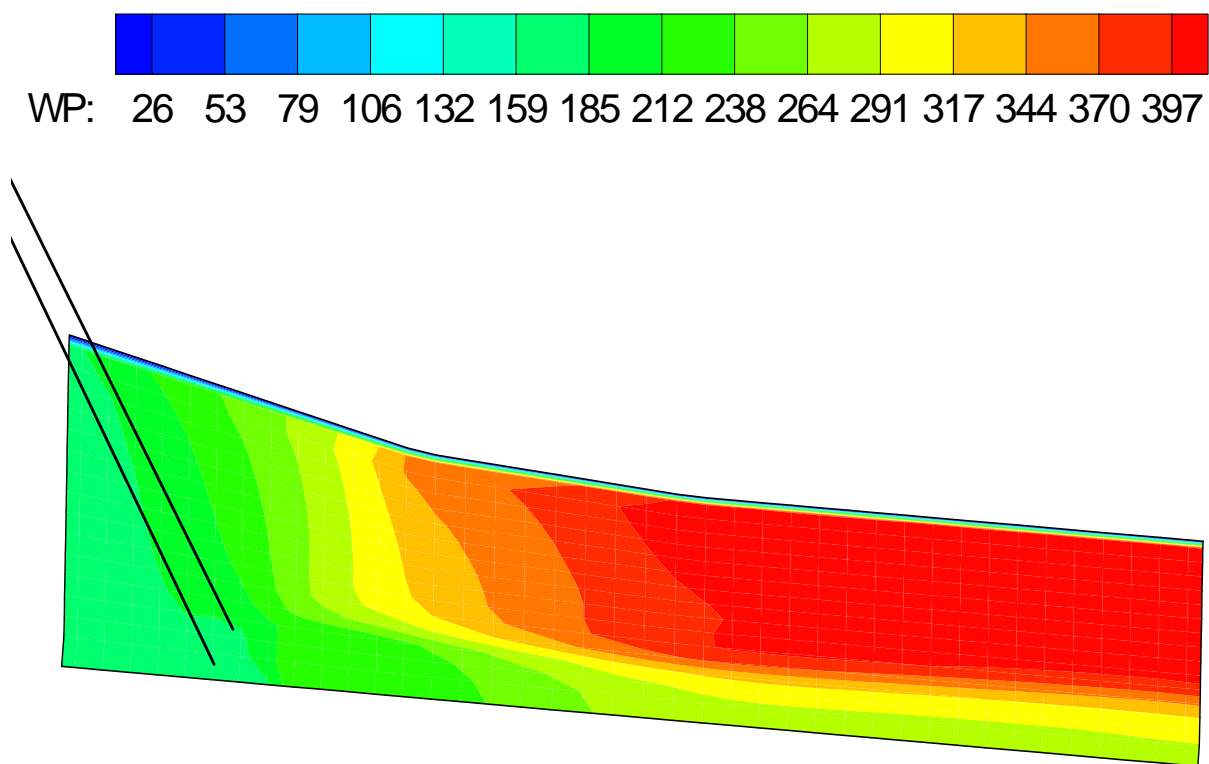


Figura 4.32: Perfil da velocidade desenvolvida no canal adutor da raceway.

5- Conclusões

As simulações confirmaram a viabilidade e a confiabilidade do modelo desenvolvido para simular a combustão de um ensaio bifásico de injeção de carvão pulverizado e ar. A respeito do modelo verifica-se que este apresenta resultados confiáveis, pois os valores apresentados são razoáveis comparados com resultados experimentais na validação, que foi feita com dados adquiridos através da revisão bibliográfica. Os resultados experimentais e calculados apresentam uma boa concordância como pode ser visto no capítulo 4, que se refere a resultados. O modelo também se comportou da forma esperada para as variações de parâmetros a que foram submetidos os ensaios de combustão.

Para confirmar a confiabilidade do modelo reconhece-se a necessidade da realização de ensaios de combustão, objetivando-se um conhecimento mais profundo dos parâmetros usados e suas variações, além de um melhor conhecimento dos pontos de coleta de dados e como foram coletados para que possam ser utilizados no modelo com maior segurança.

Apesar dos tópicos ainda não verificados, o modelo sugerido nesta dissertação, representa um passo importante no estudo da queima de carvão pulverizado. Porque este amplia a possibilidade de verificar a viabilidade do uso de carvões, os quais ainda não foram testados para fins siderúrgicos, sem a necessidade prévia de investimentos em ensaios, conhecendo se apenas dados obtidos em análise elementar e imediata. Este modelo soma-se aos diversos estudos desenvolvidos para verificar a combustibilidade de carvões e,

apresenta-se como uma ferramenta complementar a estes, no intuito de minimizar custos com ensaios, sabendo-se previamente como determinado carvão ou misturas de carvões se comportariam nos ensaios de combustão.

Para a simulação do canal adutor da raceway obteve-se um consumo de aproximadamente 28 % da massa do carvão pela combustão, dos quais o consumo do carbono fixo foi de 0,01 Kg/Kg de PCI, o consumo de carbono fixo é baixo nesta região como era de se esperar, enquanto que para a combustão de voláteis atingiu-se 0,26 Kg/Kg de PCI, o oxigênio foi consumido 0,42 % nesta região. A composição média percentual do gás deixando a raceway foi de: 19,8 de oxigênio, 74,6 de nitrogênio, 1,5 de água, 1,33 de hidrogênio, 2,4 de monóxido de carbono e 0,24 de dióxido de carbono. A queda de pressão obtida foi de 0,23 atm., enquanto que as temperaturas médias atingidas foram de 1118°C para o gás, 1837°C para as partículas e temperatura máxima da partícula 3158°C.

De posse dos resultados apresentados conclui-se ainda, que o modelamento matemático é uma ferramenta viável por expandir as técnicas de estudos de materiais sem a necessidade de investimentos elevados em equipamentos. A confiabilidade dos modelos e a grande variedade de processos, que podem ser simulados sem a demanda de custos elevados coloca a simulação computacional dentre as principais ferramentas para verificação e viabilização de processos nos dias atuais.

6- Sugestões para Trabalhos Futuros

O presente capítulo sugere alguns trabalhos, para a complementação do estudo aqui apresentado, com o objetivo de desenvolver o modelo e aproximá-lo cada vez mais da realidade do processo.

A primeira sugestão seria a inserção da cinética do enxofre no modelo para verificar como esta substância se comporta no ensaio de combustão.

Uma outra sugestão seria a realização de um ensaio de combustão para conhecimento do comportamento de carvões e parâmetros variados durante o ensaio para promover maior confiabilidade dos resultados obtidos experimentalmente.

Posteriormente, propõe-se o estudo de carvões brasileiros isolados ou em misturas para atestar a viabilidade do uso destes como combustível para injeção em altos-fornos.

Pode-se no futuro ainda expandí-lo para um modelo ainda mais próximo da realidade do processo, como simular a interferência na forma da raceway, do ângulo de injeção, do ponto de injeção e outras variáveis do processo.

Realização simulação da injeção de carvões no modelo total do alto-forno.

7- Referências Bibliográficas

- ADAMS, K.E., GLASSON, D.R., JAYAWEERA, S.A.A., *Development of porosity during the combustion of coals and cokes*, Pergamon, 27, N01, p.95-101, 1989.
- AUSTIN, P.R., NOGAMI, H., YAGI, J.I., *A mathematical model for blast furnace reaction analysis based on the four fluid model*, ISIJ, N° 8, p 748-755,1997.
- BABICH, A. *et al. Increases of pulverized coal use efficiency in blast furnace*, ISIJ, Vol. 36, N° 10, p 1250-1258,1996.
- BERTLING, H., *Coal and Coke for Blast Furnaces* ,ISIJ, Vol.39, N° 8, p 617-624, 1999.
- BOOL III, L. E., PETERSON,T.W., WENDT,J. O . L., *The partitioning of iron during the combustion of pulverized coal*, *Combustion and Flame*, vol. 100,p.262-270, 1995.
- CASTRO, J.A., *A multi-dimensional transient mathematical model of blast furnace based on mult-fluid model*, Institute for advanced material processing, Tohoku University, Japão, Tese Doutorado, 2000.
- FU, W. B., ZHANG, B. L., ZHENG, S. M., *A relationship between the kinetic parameter of char combustion and the coal's properties*, *Combustion and Flame*, Vol. 109, p. 587-598, 1997.
- GOMES, M.L.I. *et al. Avaliação de carvões gaúchos e importados para PCI*, XXXIII Seminário de redução de minério de ferro e matérias primas 2003.

- GUO, Y. C., CHAN, C. K., LAU, K.S., *Numerical studies of pulverized coal combustion in a tubular coal combustor with slanted oxygen jet*, Fuel, Vol.82, p. 893-907, 2003.
- HUTNY, W. P., LEE, G. K., PRICE, J. T., *Fundamentals of coal combustion during injection into a blast furnace*, Energy Combustion Science, Vol.17, p.373-395, 1991.
- ICHIDA, M. et al. *Behavior of fines in the blast furnace*, ISIJ, Vol. 32, N° 4, p 505-513, 1992.
- IWANAGA, Y., *Gasification rate analysis of unburnt pulverized coal in blast furnace*, ISIJ, Vol.31 N° 5, p 500-504, 1991.
- INTERNATIONAL COMMITTEE FOR COAL AND ORGANIC PETROLOGY (ICCP SYSTEM 1994), *The new vitrinite classification*, Fuel, Vol. 77, N0 5, p. 349-358, 1998.
- (ICCP SYSTEM 1994), *The new vitrinite classification*, Fuel, Vol. 80, p. 459-471, 2001.
- JUNK, K. W., BROWN, R. C., *A model of coal combustion dynamics in a fluidized bed combustor*, Combustion and Flame, 95, p. 219-228, 1993
- KHAIRIL et al. *Fundamental reaction characteristics of pulverized coal at high temperature*, ISIJ, N° 2, p 136-141, 2001.
- LEE, C.W., JENKINS, R.G., SCHOBERT, H.H., *Structure and reactivity of char from elevated pressure pyrolysis of Illinois N° 6 bituminous coal*, Energy & Fuel, N°6, p.40-47, 1991
- LIN, S.Y., HIRATO, M., HORIO, M., *The characteristics of coal char gasification at around ash melting temperature*, Energy & Fuels, N° 8, p 598-606, 1994.
- LIU, G.S. et al. *Modeling of a pressurized entrained flow coal gasifier: the effect of reaction kinetics and char structure*, Elsevier, vol. 79, p.1767-1779, 2000.
- LIU, H. et al. *Sulfation behavior of limestone under high CO₂ combustion concentration in O₂/CO₂ coal combustion*, Fuel, vol. 79, p. 945-953, 2000.

_____, *Drastic SO_x removal and influences of varios factors in O₂/CO₂ Pulverized coal combustion system*, Fuel, vol. 15, p. 403-412, 2001.

MACHADO, F.S., *Comparação entre os finos de carvão vegetal e de carvão mineral para a injeção nas ventaneiras de um alto - forno siderúrgico*, Instituto de Florestas, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Tese Mestrado, 2002.

MAKI, A. et al. *High Rate coal injection of 218 Kg/t at Fukuyama No.4 blast furnace*, ISIJ, Vol. 36, N06, p. 650-657, 1996.

MITCHELL, R.E., *Mechanism of pyrite oxidation to non-slagging species*, Mechanical Engineering Department Stanford University, Stanford, California, Report Prepared for National Energy Technology Laboratory, 2002.

OHNO, Y. FURUKAWA, T., MATSU-URA, M., *Combustion behavior of pulverized coal in a raceway cavity of blast furnace and its application to a large amount injection*, ISIJ, Vol. 34, N08, p. 641-648, 1994.

REIS, H. M. B. et al. *Influencia da composição maceral de carvão pulverizado na eficiência de combustão no raceway do alto-forno*, XXXIII seminário de redução de minério de ferro e matérias –primas, Ouro Preto, MG, 2003.

ROWENA, J. et al. *Sulphur retention as CaS (s) during coal combustion: a modeling study to define mechanism and possible technologies*, Fuel, vol. 72, p. 633-643, 1993.

SAITO, M. et al. *Combustion behavior of pulverized coal particles in a high temperature and high oxygen concentration atmosphere*, Fuel, vol. 70, p. 709-712, 1990.

_____. *Combustion rates of pulverized coal particles in high-temperature/high-oxygen concentration atmosphere*, Combustion and Flames, Vol. 87, p.1-12, 1991

SAMPAIO, R. S., SAAD, M. W., NETO, A. N. S., *Avaliação de carvões e minérios de ferro para os novos processos de produção de ferro primário*, Novos processo de produção de ferro primário, Belo Horizonte, MG, 1995.

- SCOTT, A. C., *Coal petrology and the origin of coal macerals: a way ahead?*, Coal Geology, Vol. 50, p. 119-134, 2002.
- SRINIVASACHAR, S., BONI, A.A, *A kinetic model for pyrite transformations in a combustion environment*, Fuel, vol. 68, p.829-836, 1988
- UENO, H., YAMAGUCHI, K., TAMURA, K., *Coal combustion in the raceway and tuyere of a Blast Furnace*, ISIJ, N°6, p 640-645,1993.
- VAMVUKA, D., SCHWANEKAMP, G., GUDENAU, H. W., *Combustion of pulverized coal with additives under conditions simulating blast furnace injections*, Fuel, vol. 75, N09, p. 1145-1150, 1996.
- WU, H. et al. *Ash liberation from included minerals during combustion of pulverized coal: the relations with char structure and burnout*, Energy & Fuels, N° 13, p 1197-1202, 1999.
- YAMAGUCHI, K., UENO, U., TAMURA, K., *Maximum injection rate of pulverized coal into blast furnace through tuyeres with consideration of unburnt char*, ISIJ, Vol. 32, N°6, p 716724, 1992.
- ZHOU, L et al. *Simulation of 3-D gas-particle flows and coal combustion in a tangentially fired furnace using a two –fluid-trajectory model*, Powder Technology, N0125, p. 226-233, 2002.
- ZOLIN et al. *A comparison of coal char Reactivity determined from Thermogravimetric and laminar flow reactor experiments*, Energy & Fuels, N° 12, p 268-276,1998.
- .

7.1- Referências Consultadas e Citadas

- ABREU, S.F., *Recursos minerais do Brasil*, 2 ed., São Paulo, Edgar Blucher, Rio de Janeiro, Instituto nacional de Tecnologia, pág. 341-347, 1973.
- BEER, J. M.,SAROFIM, A. F., KANG,S.W., *Third European conference on coal liquid mixtures*, Hemisphere Publishing corporation, Nova Iorque,USA, 1987, pág. 179.

LEPREVOST, A., *Minerais para a indústria*, Rio de Janeiro, Livros técnicos e científicos, Curitiba, Universidade Federal do Paraná, pág. 149-153, 1978.

LEVENSPIEL, O., *Engenharia das reações químicas*, São Paulo, Edgard Blucher, Vols. 1-2, 1974.

MERRICK, D. *The thermal decomposition of coal: Mathematical models of the chemical and Physical changes*, Coal Science and technology, Vol. 10, Elsevier science Pub. B .V., pág. 307-410, 1987.

SPACKMAN, W. *The maceral concept and the study of modern environments as a means of understanding the nature coal*, Transactions of the New York Academy Science series II, Vol. 20, pág. 411-423, 1958.

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)