



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

**Tese
de
Doutorado**

**Modelamento Matemático e Simulação Computacional
da Combustão de Carvão e Biomassa em Reator de
Leito Fluidizado Borbulhante Para uso em Centrais
Termoelétricas**



Livros Grátis

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

Milhares de livros grátis para download.

Anderson Willian de Souza Baltazar

“ Modelamento Matemático e Simulação Computacional da Combustão de Carvão e Biomassa em Reator de Leito Fluidizado Borbulhante Para uso em Centrais Termoelétricas.”

Estudo apresentado ao curso de pós-graduação em Engenharia metalúrgica da Universidade Federal Fluminense, como requisito para obtenção do título de doutor em Engenharia Metalúrgica.

Orientador: Prof^o. Ph.D. José Adilson de Castro
Co-orientador: Prof^o. Dr.Ing. Alexandre José da Silva

Volta Redonda

2008

Dedicatória:

Esta Tese é dedicada a DEUS que tem me capacitado com perseverança, longanimidade e fé para tão árduo trabalho. A minha família e amigos, os quais têm suportado a realização deste sonho.

Agradecimentos

Agradeço aos professores e funcionários do PPGEM/EEIMVR-UFF Pólo Universitário de Volta Redonda, que sempre atenderam com presteza e boa vontade quando solicitados. Em especial meus orientadores José Adilson de Castro e Alexandre José da Silva sem os quais este trabalho não seria idealizado e desenvolvido.

Aos colegas que pela convivência diária tornaram-se uma parcela da minha família que onde quer que eu esteja estarão em meu coração. Em especial àqueles que somaram com discussões, técnicas ou informais, ao meu desenvolvimento pessoal e profissional, dentre os quais meus amigos Gláucio, Gustavo, Neil e Fabíola dentre muitos outros que não ousou citar, pois senão esta lista seria maior que o trabalho.

A minha família meu pai, minha mãe, irmãs e sobrinhos que sempre tiveram que agüentar meu mau humor, ausência, mas que com amor e paciência compreenderam meus medos, frustrações e inseguranças no desenvolvimento desta tese e me auxiliaram de todas as formas possíveis.

O Principal agradecimento, porém, é 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.

Apliquei o meu coração a esquadrihar e a informar-me com sabedoria de tudo que se sucede debaixo do céu; essa enfadonha ocupação deu DEUS aos filhos dos homens, para nela os exercitar.

E, de mais disso, filho meu, atenta: não há limite para fazer livros, e o muito estudar enfado é da carne. De tudo que se tem ouvido, o fim é: Teme a DEUS e guarda os seus mandamentos; porque este é o dever de todo homem.

Eclesiastes: 1.13; 12.12-13

Lista de Figuras

Figura 1.1.1	Esquema da geração termelétrica de energia utilizando reator de leito fluidizado.	13
Figura 1.2.1	Classificação de leito segundo Karppanen, (a) Leito fixo, (b) Leito borbulhante, (c) Leito turbulento e (d) Leito circulante.	15
Figura 1.2.2	Movimento típico das partículas dentro de um reator de leito fluidizado.	16
Figura 1.2.3	Tipos de contato entre os sólidos e o fluido em um leito.	16
Figura 1.2.4	Exemplo da simulação de Helland mostrando a formação de cluster em leito fluidizado.	23
Figura 1.2.5	Resultados do modelo de Yuu mostrando a formação de bolhas em leito fluidizado.	24
Figura 1.2.6	Resultados Obtido por Taghipour para a fração volumétrica de um leito em 2D.	25
Figura 1.2.7	Micrografia mostrando um grânulo de pirita incrustado na matéria carbonosa.	28
Figura 1.2.8	Representação da composição de uma molécula de carvão.	29
Figura 2.3.1	Fluxograma da solução numérica utilizada na solução das equações apresentadas no modelo.	51
Figura 2.3.2	Solução pelo método dos volumes finitos.	51
Figura 3.1.1	Imagem em 3D mostrando a malha gerada e os tipos de condições usadas no modelo.	55
Figura 3.1.2	Evolução da altura de um leito fluidizado em um plano vertical com "time step" de 10^{-6} s.	56
Figura 3.1.3	Linhas de corrente das partículas no leito (a) e imagem 3D mostrando o contorno da fração volumétrica em uma coluna de leito fluidizado, depois de ($t = 3s$).	57
Figura 3.1.4	Contorno da fração volumétrica das partículas usando diferentes velocidades do gás (a) $U = 0,12m/s$ e (b) $0,72m/s$.	58
Figura 3.1.5	Queda de pressão obtida por este modelo e modelos da literatura.	59
Figura 3.1.6	Comparação da taxa de expansão do leito fluidizado H/H_0 resultados apresentados por Taghipour e, este modelo com velocidades do gás de ($U = 0,12; 0,38; 0,72m/s$).	60
Figura 3.2.1	Geometria e dimensões do reator de leito fluidizado.	62
Figura 3.2.2	Malha gerada para discretização das equações.	62
Figura 3.2.3	Imagem 3D da fração volumétrica da fase sólida. ($t=4,0s$)	63
Figura 3.2.4	Evolução transiente da fluidização. ($t=0 - 4,0s$)	64
Figura 3.2.5	Fração volumétrica de sólidos no interior do reator; (a) plano X; (b) plano Y; (c) plano Z. ($t=5s$)	65
Figura 3.2.6	Linhas de corrente "stream traces" do movimento das partículas no reator. ($t=5s$)	66
Figura 3.3.1	Queda de pressão ΔP com diferentes velocidades de entrada do gás.	68
Figura 3.3.2	Taxa de expansão H/H_0 do leito para diferentes velocidades de entrada do gás.	68
Figura 3.3.3	Queda de pressão no leito para diferentes alturas iniciais de partículas.	69

Figura 3.3.4	Queda de pressão no leito para diferentes valores de coeficiente de restituição da partícula (e).	70
Figura 3.3.5	Queda de pressão no leito para diferentes valores densidade da partícula (d).	71
Figura 3.3.6	Queda de pressão no leito para diferentes malhas.	72
Figura 3.4.1	Comportamento do CO resultante da combustão.	75
Figura 3.4.2	Comportamento do CO ₂ resultante da combustão.	76
Figura 3.4.3	Comportamento do vapor d'água no interior do reator.	76
Figura 3.4.4	Comportamento do SO no interior do reator.	77
Figura 3.4.5	Comportamento do SO ₂ no interior do reator	78
Figura 3.4.6	Comportamento do carvão no interior do reator.	78
Figura 3.4.7	Comportamento dos gases de combustão em função do tempo de reação.	79
Figura 3.4.8	Comportamento do CO resultante da combustão.	80
Figura 3.4.9	Comportamento do CO ₂ resultante da combustão.	81
Figura 3.4.10	Comportamento do vapor d'água resultante da combustão.	81
Figura 3.4.11	Comportamento do SO no interior do reator.	82
Figura 3.4.12	Comportamento do SO ₂ no interior do reator.	82
Figura 3.4.13	Comportamento do carvão no interior do reator.	83
Figura 3.4.14	Comportamento dos gases de combustão em função do tempo de reação.	84
Figura 3.4.15	Comportamento do CO resultante da combustão.	85
Figura 3.4.16	Comportamento do CO ₂ resultante da combustão.	85
Figura 3.4.17	Comportamento do vapor d'água no reator.	86
Figura 3.4.18	Comportamento do SO no interior do reator	87
Figura 3.4.19	Comportamento do SO ₂ no interior do reator.	87
Figura 3.4.20	Comportamento dos gases de combustão em função do tempo de reação.	88
Figura 3.4.21	Comportamento dos gases de combustão e temperatura em função do tempo de reação.	89
Figura 3.4.22	Taxas de reação em função do tempo de reação.	90
Figura 3.4.23	Comportamento dos gases de combustão e temperatura em função do tempo de reação.	91
Figura 3.4.24	Taxas de reação em função do tempo de reação.	91
Figura 3.4.25	Comportamento dos gases de combustão e temperatura em função do tempo de reação.	92
Figura 3.4.26	Taxas de reação em função do tempo de reação.	93
Figura 3.4.27	Comportamento do SO e SO ₂ .	93
Figura 3.4.28	Comportamento dos gases de combustão e temperatura em função do tempo de reação.	94
Figura 3.4.29	Taxas de reação em função do tempo de reação.	95
Figura 3.4.30	Evolução da temperatura no interior do reator (1-60 minutos).	96
Figura 3.4.31	Fração volumétrica de biomassa no reator (1-60 minutos).	97

Lista de Tabelas

Tabela 2.1.1	Fases e componentes do modelo matemático.	35
Tabela 2.2.1	Termos fonte para as frações mássicas das espécies químicas.	36
Tabela 2.2.2	Termos fonte de energia.	44
Tabela 2.2.3	Termos fonte de momento.	45
Tabela 3.1.1	Parâmetros para simulação.	54
Tabela 3.2.1	Parâmetros para simulação do reator de leito fluidizado.	61
Tabela 3.4.1	Análise imediata e elementar dos carvões e biomassa.	73
Tabela 3.4.2	Parâmetros para simulação do reator.	74

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	$[m^2/s]$
d_i	Diâmetro da partícula para a fase i	$[m]$
e	Coeficiente de restituição	$[-]$
\dot{E}_{i-j}	Transferência de calor convectivo entre as fases i e j	$[W/m^3]$
E_i	Emissividade da fase i	$[-]$
\vec{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}	Coeficiente de transferência de calor entre as fases i e j	$[W/m^2.K]$
I	Tensor tensão adimensional	$[-]$
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)	$[-]$

Símbolos gregos

Γ_ϕ	Coeficiente de difusão na equação.	[-]
ε_i	Fração volumétrica da fase i	[-]
ε_j	Energia molecular característica da interação para a espécie j	[J]
ζ_m	Fator de tortuosidade para o componente m	[-]
Θ	Temperatura granular	[m ² /s ²]
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	[-]
φ_i	Fator de forma para a fase i	[-]
τ	Tensor tensão viscosidade	[N/m ²]
γ	Dissipação de energia	[kg/m ³ s]
λ	Viscosidade bulk	[g/ms]

Subscrito e Sobrescrito

g	Gás
pc	Carvão pulverizado
s	Sólido
mf	Mínima fluidização

Sumário	
Resumo	7
Abstract	8
Capítulo 1- Introdução, Objetivos e Revisão Bibliográfica	9
1.1- Introdução	10
1.1.1- Motivação	12
1.1.2- Objetivos	13
1.2- Revisão bibliográfica	14
1.2.1- O reator de leito fluidizado	14
1.2.2- Estado da arte em modelamento matemático em fluidização	20
Capítulo 2: Metodologia	33
2.1- Modelamento matemático	33
2.2- Termos Fonte	35
2.2.1- Fontes das equações de massa	36
2.2.2- Fontes das equações de energia	43
2.2.3- Fontes das equações de momento	44
2.3- Propriedades das fases	47
2.3.1- Propriedades do gás	48
2.3.2- Propriedades dos combustíveis	49
2.4- Considerações sobre o modelo desenvolvido	52
Capítulo 3- Resultados e discussão	53
3.1- Aplicação a um experimento de fluidização	53
3.2- Aplicação a um combustor de leito fluidizado	61
3.3- Análise de sensibilidade do modelo	67
3.4- Combustão de carvão e biomassa RLF semi-industrial	73
3.4.1- Simulação da combustão dos carvões	75
3.4.2- Simulação da combustão de carvões e biomassa	89
Capítulo 4- Conclusões	89
Capítulo 5- Sugestões para trabalhos futuros	93
Capítulo 6- Referências bibliográficas	95

Resumo:

A tecnologia de fluidização vem sendo amplamente utilizada para combustão em processo de geração termelétrica. O funcionamento é simples e os combustíveis utilizados podem apresentar qualidade inferior àqueles normalmente utilizados em processos industriais, que requerem alta eficiência de combustão. Este processo já é utilizado eficazmente há anos nas indústrias de petróleo e química, mas só a partir das décadas de 80-90 é que cresce o uso para geração de energia. No Brasil a técnica começa a difundir-se na tentativa promissora de resgatar o uso do carvão nacional que é rejeitado pela maioria dos processos industriais, devido ao elevado teor de cinzas e enxofre. No desenvolvimento desta tese será utilizada modelagem matemática e simulação computacional, que é uma ferramenta que está em ápice de reconhecimento por reproduzir, virtualmente, resultados industriais. Isto gera uma redução de custos devido ao fato de não demandar consumo de matérias-primas e gastos com experimentos e equipamentos. O modelo desenvolvido é transiente em 3D e acopla a fluidodinâmica e a cinética de reações para o processo em reator de leito fluidizado em escala semi-industrial. O conceito de mecânica do contínuo, o qual considera uma coleção de partículas como idênticas contendo diâmetro e densidades representativos, é utilizado e as fases se interpenetram transferindo momento, energia e massa. As equações de transporte de massa, momento e energia são resolvidas pelo método de volumes finitos e, foram implementadas em Fortran 90/95. Os resultados apresentados mostraram-se em concordância com os de processo e fenômenos para leito fluidizado descritos na literatura.

Palavras-chave: Reator de leito fluidizado, Modelagem e Simulação computacional 3D, Transiente.

Abstract:

The technology of fluidization has been widely used for combustion in the process of thermo electric generation. The operation is simple and fuels to be used may have inferior quality to those normally used in a industrial processes, which require high efficiency of combustion. This process is already used effectively for years in oil and chemical industries, but only from decades of 80-90 is that the growing use for energy generation. In Brazil only now the technique beginning to spread out as an attempt promising to rescue the use of national coal which is rejected by most industrial processes because of the high levels of ash and sulphur. In developing of this thesis will be used mathematical modeling and computer simulation, which is a tool that at apex of recognition by plays, virtually, industrial results. This generates a cost savings due to the fact that not against consumption of raw materials and expenses with experiments and equipment. The model developed is transient in 3D and engages the fluid dynamic and the kinetics of a range of reactions to describe the process. The concept of the continuum mechanics, where a collection of particles is considered to be identical with a representative diameter an densities, is used and the phases is considered interpenetrating transferring momentum, energy and mass. The transport equations of mass, momentum and energy are solved by finite volumes method and were implemented in a complex computational code written in Fortran 90/95. The presented results are in close agreement with previous results of industrial scale for the process and phenomenon of fluidized bed reactors described on literature.

Keywords: Fluidized bed reactor, 3D Modeling and computational simulation, Transient.

Capítulo 1: Introdução, Objetivos e Revisão Bibliográfica

Esta tese tem como princípio o desenvolvimento de um modelo matemático, que represente os fenômenos físicos e químicos do processo de combustão de carvão mineral e biomassa em reator de leito fluidizado. O modelo desenvolvido busca auxiliar no esclarecimento da fenomenologia do processo de fluidização e combustão, servindo como uma ferramenta preditiva para a avaliação de parâmetros operacionais e avaliação do uso de novas matérias-primas.

No **capítulo 1** uma breve introdução é apresentada associada a uma revisão bibliográfica para familiarizar o leitor ao combustor de leito fluidizado e a fluidização. Além, de fornecer um panorama dos estudos de leito fluidizado até o momento do desenvolvimento deste. O **capítulo 2** narra a metodologia do modelo matemático e apresenta as equações matemáticas e, a técnica utilizada para resolvê-las. Explicando os caminhos escolhidos e porque para que o leitor possa seguir e entender o desenvolvimento deste trabalho. O **capítulo 3** apresenta os resultados obtidos com o uso do modelo discutindo-os tentando elucidar e explicar cada um deles a luz do comportamento do processo considerando aspectos técnicos e científicos. O **capítulo 4** apresenta as conclusões gerais acerca do trabalho aqui apresentado enquanto que o **capítulo 5** fornece algumas sugestões para o prosseguimento desta linha de pesquisa. O **capítulo 6** apresenta a bibliografia utilizada para o desenvolvimento desta tese.

1.1- Introdução

Reatores de leito fluidizado são conhecidos desde 1920, porém só começaram a ser usados em maior escala para combustão a partir de 1970, embora seu uso fosse notoriamente reconhecido nas indústrias químicas e de petróleo (AHUJA & PATWARDHAN, 2008; ZHU & ZHU, 2008; BITTANTI et al., 2000). O ápice de utilização deste equipamento, porém, se inicia nas décadas de 80 e 90 (BITTANTI et al., 2000; BI et al., 2000), quando o interesse para o uso em instalações para geração de energia aumenta. Isto ocorre porque o processo em reatores de leito fluidizado permite uma flexibilidade de combustíveis e apresenta influências ambientais positivas. Dentre as vantagens do uso dessa tecnologia pode-se destacar a alta eficiência de combustão, baixas emissões de NO_x e SO_x e a habilidade para queimar combustíveis com uma especificação qualitativa ampla (ZHANG et al., 2008; KARPPANEM, 2000). Adicionalmente a operação do leito fluidizado é relativamente simples e os combustíveis utilizados podem ser de baixa qualidade tais como: carvões de baixo carbono, resíduos de minas, lixo e biomassa (BITTANTI et al., 2000). Carvões com alto teor de cinzas e enxofre, que pode ser capturado pela adição de óxido de cálcio podem também ser utilizados (SHUYAN et al., 2008; BASU, 1999). No Brasil, esta técnica ainda não está amplamente difundida e o carvão mineral nacional não é muito utilizado em processos industriais, por apresentar elevado teor de cinzas e enxofre. No entanto, os carvões nacionais apresentam boa combustibilidade devido às suas propriedades petrográficas, destacando-se o elevado teor de vitrinita entre outras substâncias (macerais) e ao elevado grau de carbonificação, que os propiciam sua utilização como combustível para a geração de energia. Soma-se ainda o fato de problemas na matriz energética abrirem as opções para o uso de novas tecnologias, das quais a geração térmica pode ser colocada como destaque importante na discussão. Carvão mineral nacional,

biomassas e alguns resíduos industriais e agrícolas podem ser usados nessa tecnologia (NEMTSOV & ZABANIOTOU, 2008).

Este trabalho propõe um modelo matemático para simular a combustão de carvão e biomassa em um reator de leito fluidizado, tendo em vista principalmente que modelos matemáticos para fenômenos de fluidização ainda são escassos. Devido, principalmente a complexa modelagem matemática e ao caráter instável das numerosas equações que devem ser resolvidas para caracterizar e determinar o processo (WEN & YU, 1966; ZHOU, FLAMANT & GAUTHIER, 2004 a; VAN WACHEM et al., 2001).

A modelagem matemática do movimento gás-sólido no interior de reatores de leito fluidizado é uma tarefa complexa, pois envolve fenômenos de interface transiente e as interações entre os componentes das fases só são conhecidas em uma região limitada (TAGHIPOUR, ELLIS & WONG. 2005). Os modelos matemáticos têm se mostrado eficientes para simular processos industriais, fornecendo resultados preliminares, minimizando custos com experimentos e consumo de matérias-primas, o que torna a técnica desejável e útil na análise e desenvolvimento de novas tecnologias, uso de novas matérias-primas e alterações de processos. Além da fluidodinâmica do processo de fluidização, será feita uma avaliação da combustão de carvão e biomassa com acoplamento entre a fluidodinâmica e os processos reativos no reator.

O processo a ser modelado é transiente tri-dimensional têm múltiplas fases, com múltiplos componentes reagindo entre si. As fases gás-sólido estão continuamente interagindo transferindo massa, momento e energia. Todas essas características são levadas em conta pelo modelamento. Utilizando para isso os princípios de mecânica do meio contínuo através de equações de transporte, que são discretizadas pela técnica de volumes finitos em uma malha não ortogonal e são resolvidas pelo método linha por linha através de uma matriz tri-diagonal. Os resultados obtidos com o uso do modelo têm sido satisfatórios e se encontram dentro do esperado para o

fenômeno e processo em questão. Mostrando se com boa concordância com resultados de experimentos e simulados obtidos na literatura, no entanto, vários parâmetros e modelos de fenômenos ainda não abordados devem ser testados e/ou introduzidos para completa análise do fenômeno de fluidização e da combustão no interior desse tipo de reator.

1.1.1- Motivação

O apelo ao uso do carvão nacional, que como já citado encontra barreiras técnicas ao seu uso é a maior motivação desse trabalho. Outro motivo é a necessidade de se buscar novas fontes para a geração de energia elétrica para auxiliar ou substituir as fontes utilizadas atualmente. A figura 1.1.1 abaixo ilustra de modo simplificado o processo de geração termoelétrica utilizando como combustível carvão e biomassa, além de apresentar também a região modelada do combustor no estudo. No esquema o combustível é alimentado em um reator de leito fluidizado. Os produtos da combustão são passados por um ciclone, onde material particulado “underflow” pode ser realimentado para o reator. Enquanto, o gás resultante da queima “overflow” segue para alimentar os queimadores da câmara de combustão de uma turbina. O gás produzido na queima necessita apresentar temperatura relativamente elevada.

Ao esquema da figura 1.1.1 pode-se ainda ter uma caldeira que aproveita o gás de exaustão da turbina para geração de vapor que irá alimentar outra turbina para geração de energia em um processo de co-geração.

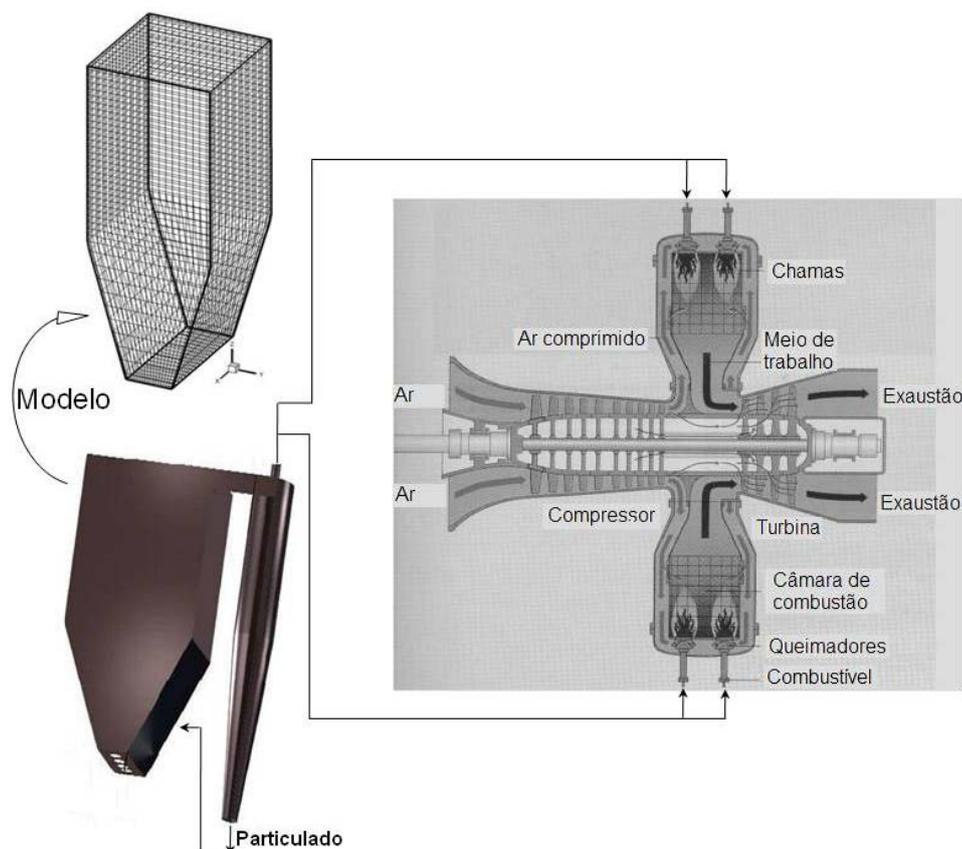


Figura 1.1.1. Esquema da geração termelétrica de energia utilizando reator de leito fluidizado.

1.1.2- Objetivos

Este trabalho propõe simular a região de queima do reator de leito fluidizado para gerar o gás que irá alimentar a turbina. A câmara de combustão do reator de leito fluidizado é o foco dessa tese e isto ocorre por se tratar de um tipo de reator com comportamento físico e reacional característicos do fenômeno de fluidização.

Uma ferramenta computacional para avaliar o comportamento das partículas se movimentando no reator de leito fluidizado e o comportamento das reações de combustão é o foco no desenvolvimento dessa tese. Isto a coloca em posição de relevância dentre os estudos desenvolvidos até o momento associando ainda o fato de o modelo apresentado ser transiente e em 3D.

Os objetivos desta tese se resumem a:

- ✓ Desenvolver um modelo matemático capaz de simular o comportamento da fluidodinâmica gás-sólido;
- ✓ Acoplar ao modelo de escoamento modelos cinéticos para avaliar os gases de combustão, introduzindo a este as reações do nitrogênio e enxofre para avaliar emissões de SO_x .

1.2- Revisão Bibliográfica

Esta seção visa à demonstração do comportamento de um reator de leito fluidizado. Mostrando também o desenvolvimento das pesquisas em simulação de leito fluidizado a fim de contextualizar o trabalho desenvolvido. Noções do conhecimento necessário para a modelagem matemática deste processo são apresentadas. Além de prever abordagens relevantes para as simulações, comportamento e desenvolvimento que podem ser feitas. Uma breve noção teórica de reatores de leito fluidizado será apresentada, seguida de uma revisão bibliográfica, a qual é uma descrição do estado da arte no estudo em questão, apresentando para isso uma breve síntese de alguns trabalhos sobre o assunto.

1.2.1- O reator de leito Fluidizado

O leito fluidizado é um sistema no qual ar distribuído por uma grade ou prato distribuidor, é soprado através de um leito de sólidos desenvolvendo uma condição fluidizada. A fluidização depende largamente do tamanho da partícula e da velocidade do ar. Estes sistemas são, freqüentemente, usados em processos onde uma reação não homogênea ocorre, devido ao fato do fenômeno de fluidização promover um maior contato entre o sólido e o gás (BITTANTI, et al., 2000). Para a operação do leito fluidizado necessita-se, portanto, de um movimento das partículas para que

haja contato entre as fases. A idéia básica de um combustor de leito fluidizado é a fluidização do leito material pela injeção primária de ar fluidizante através do fundo da câmara de combustão (KARPPANEN, 2000).

Os leitos fluidizados podem ser classificados de várias formas de acordo com a forma de contato entre o sólido e o fluido. Karppanen propõe quatro formas que estão descritas na figura 1.2.1. Um leito fluidizado apresenta uma fluidodinâmica muito complexa causada pelas interações entre as fases gasosa e sólida. Os mecanismos que dirigem os movimentos dos gases e sólidos são difíceis de serem identificados e descritos.

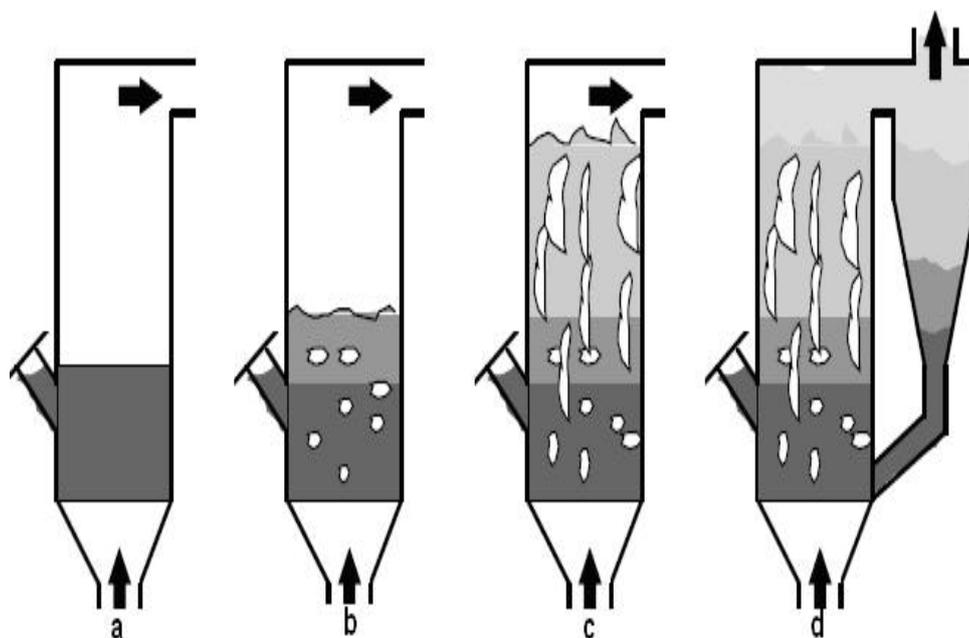


Figura 1.2.1. Classificação de leito segundo Karppanen, (a) Leito fixo, (b) Leito borbulhante, (c) Leito turbulento e (d) Leito circulante.

No entanto, um modelo simplificado dos sólidos pode ser visto na figura 1.2.2. Onde o movimento típico dentro de um reator de leito fluidizado é mostrado. A densidade do sólido aumenta perto das paredes, porque a velocidade do gás é menor. Uma parte das partículas se combinam formando aglomerados conhecidos como “clusters”, que escoam e formam a circulação do material dentro do reator ou câmara de combustão (KARPPANEN, 2000).

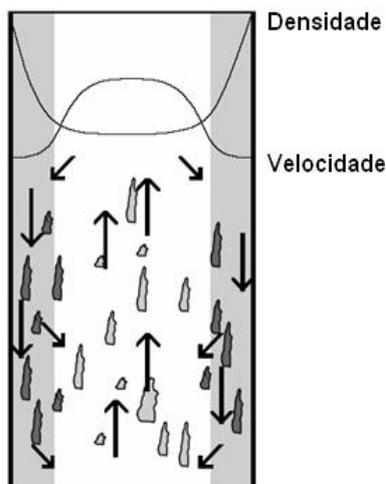


Figura 1.2.2. Movimento típico das partículas dentro de um reator de leito fluidizado proposto. (KARPPANEN, 2000)

O fenômeno de fluidização é bem visível se considerarmos um leito vertical de partículas sólidas suportado por um prato poroso ou um distribuidor perfurado (figura 1.2.3 (a)). Na figura 1.2.3 (a) pode ser visto a representação esquemática do leito fixo (FOGLER, 2002; KUNII & LEVENSPIEL, 1991). No leito existe um arraste das partículas sólidas pelo gás escoando. Se ρ_c é a densidade das partículas sólidas, A_c é a área de seção transversal, h_s é a altura do leito antes das partículas começarem a se mover, h é a altura do leito em qualquer tempo e ε_s e ε são as correspondentes porosidades, então, a massa de sólidos no leito, W_s é:

$$W_s = \rho_c A_c h_s (1 - \varepsilon_s) = \rho_c A_c h (1 - \varepsilon) \quad 1.2.1$$

Esta relação é a consequência do fato que a massa do leito ocupada apenas por partículas sólidas é a mesma sem matéria, que é a porosidade do leito. Quando a força de arraste excede a força gravitacional, as partículas começam a se mover e o leito expande e, assim, a porosidade do leito aumenta. Este aumento na porosidade do leito decresce o arraste até que este esteja novamente

balanceado pela força gravitacional total exercida na partícula sólida figura 1.2.3 (b) (FOGLER, 2002; KUNII & LEVENSPIEL, 1991).

Se a velocidade é consideravelmente aumentada, a expansão do leito continua a ocorrer. As partículas sólidas começam a ser separadas umas das outras e começam a colidirem e se moverem no leito da mesma maneira. Aumentando a velocidade mais um pouco se inicia uma instabilidade e um pouco de gás começa a passar pelo leito e formar bolhas figura 1.2.3 (c). Estas bolhas crescem em tamanho aumentando, portanto a coluna preenchida do leito. Coincidentemente, os sólidos no leito começam a se moverem para cima, para baixo e ao redor do leito e uma grande agitação aparece como um misturador borbulhante. Como parte das bolhas atravessa o leito, os sólidos começam a se mover como se fossem partes do fluido. O leito de partículas é dito então fluidizado. Um aumento na velocidade resultará num escoamento lento figura 1.2.3 (d) e, numa operação instável e caótica do leito. Finalmente para velocidades extremamente altas, as partículas são sopradas ou transportadas para fora do leito figura 1.2.3 (e) (FOGLER, 2002; KUNII & LEVENSPIEL, 1991).

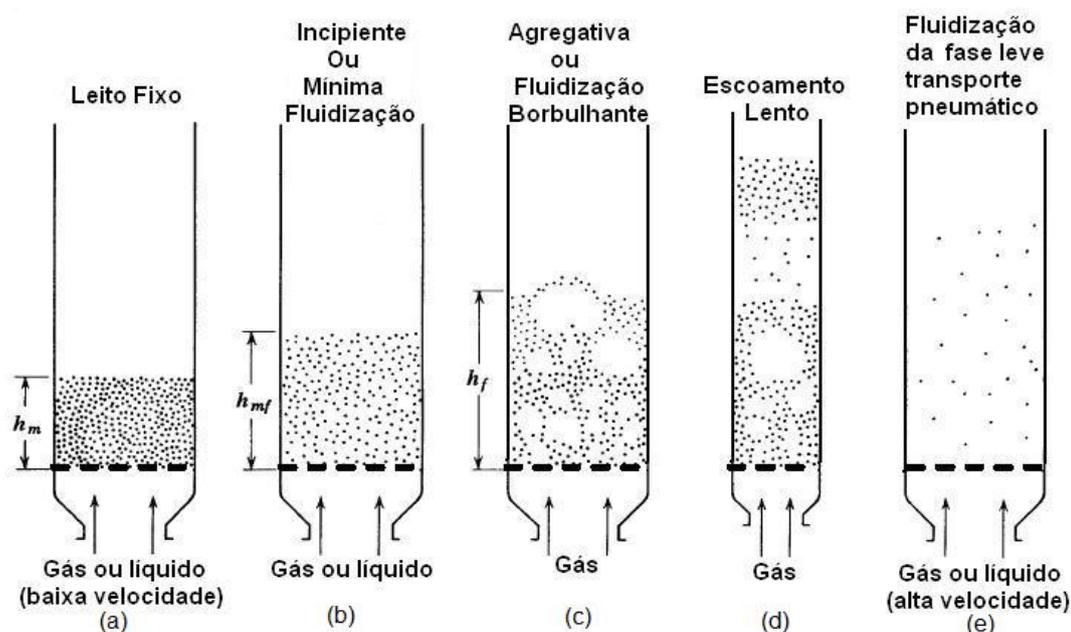


Figura 1.2.3. Tipos de contato entre os sólidos e o fluido em um leito proposto. (KUNII & LEVENSPIEL, 1991)

Depois do arraste exercido nas partículas tornar-se igual à força gravitacional exercida nas partículas, a queda de pressão não aumentará com o aumento da velocidade ao redor desse ponto. Então, a queda de pressão pode ser dada pela equação abaixo.

$$\Delta P = g(\rho_c - \rho_g)(1 - \varepsilon)h \quad 1.2.2$$

A partir do ponto onde as bolhas começam a aparecer no leito, a velocidade do gás pode ser aumentada normalmente acima de uma faixa considerável sem variação na queda de pressão através do leito, ou escoamento das partículas para fora do leito. As bolhas começam a ser mais freqüentes e o leito, mais fortemente agitado com o aumento da velocidade do gás, mas as partículas permanecem no leito. Esta região é a fluidização borbulhante. Este processo depende das características físicas do gás, das partículas sólidas e do prato distribuidor (FOGLER, 2002; DAW et al., 2000; KUNII & LEVENSPIEL, 1991).

A velocidade de mínima fluidização denota o valor de um termo particular, quando o leito está apenas começando a ser fluidizado. Neste ponto de mínima fluidização, o peso do leito é exatamente igual à queda de pressão através do leito.

$$W_s = \Delta P A_c \quad 1.2.3$$

$$g(1 - \varepsilon)(\rho_c - \rho_g) = \rho g U^2 \left[\frac{150(1 - \varepsilon)}{\text{Re}_p \psi} + \frac{7}{4} \right] \frac{1 - \varepsilon}{\psi d_p \varepsilon^3} A_c h \quad 1.2.4$$

Para $\text{Re}_p < 10$, ($\text{Re}_p = \rho_g d_p U / \mu$), após algumas manipulações a velocidade de mínima fluidização pode ser dada por:

$$U_{mf} = \frac{(\psi d_p)^2}{150 \mu} [g(\rho_c - \rho_g)] \frac{\varepsilon_{mf}^3}{1 - \varepsilon_{mf}} \quad 1.2.5$$

Onde ψ é a esfericidade dada por:

$$\psi = \frac{A_s}{A_p} = \frac{\left(\pi \left(\frac{6V_p}{\pi} \right)^{2/3} \right)}{A_p} \quad 1.2.6$$

e ε_{mf} é a fração de vazios para mínima fluidização calculada pela equação

$$\varepsilon_{mf} = 0,586\psi^{-0,72} \left(\frac{\mu^2}{\rho_g \eta d_p^3} \right)^{0,29} \left(\frac{\rho_g}{\rho_c} \right)^{0,021} \quad 1.2.7$$

A máxima fluidização ocorre quando a velocidade do gás atinge um valor suficientemente elevado. Portanto, o arraste de uma partícula individual superará a força gravitacional na partícula e a partícula será carregada pelo gás para fora do leito. Quando a velocidade do gás excede a velocidade terminal de queda livre da partícula, u_t , a partícula será carregada leito acima com a corrente de gás. Para partículas finas, o número de Reynolds será pequeno e duas relações são apresentadas para a velocidade terminal (FOGLER, 2002; KUNII & LEVENSPIEL, 1991).

$$u_t = \frac{\eta d_p^2}{18\mu} \quad (\text{Re} < 0,4) \quad 1.2.8$$

$$u_t = \left(\frac{1,78 \cdot 10^{-2} \eta^2}{\rho_g \mu} \right)^{1/3} d_p \quad (0,4 < \text{Re} < 500) \quad 1.2.9$$

Onde, $\eta = g(\rho_c - \rho_g)$.

Determinada a máxima e a mínima velocidade superficiais nas quais se deve operar o leito, a velocidade superficial de entrada u_0 , deve estar acima da velocidade de mínima fluidização, mas abaixo da de escoamento lento e da velocidade terminal.

$$U_{mf} < U_0 < U_t \text{ e } U_{mf} < U_0 < U_{ms} \quad 1.2.10$$

Ambas as condições acima devem ser satisfeitas para que seja obtida uma precisa operação do reator de leito fluidizado (FOGLER, 2002; KUNII & LEVENSPIEL, 1991).

1.2.2- Estado da arte em modelamento matemático em fluidização

O modelamento matemático e a simulação computacional para o fenômeno de fluidização se encontram atualmente em dois rumos distintos: o primeiro utiliza o método baseado na dinâmica molecular (modelo lagrangeano), o segundo se baseia na mecânica do contínuo (multi-fluido ou modelo euleriano) (AHUJA & PATWARDHAN, 2008; SUN & BATTAGLIA, 2006; TAGHIPOUR, ELLIS & WONG, 2005; VAN WACHEM et al., 2001).

No modelo lagrangeano para o escoamento das duas fases (sólida e gás), as equações de movimento são resolvidas para cada partícula e inclui os efeitos de colisão e das forças do gás agindo sobre as partículas. No modelo euleriano as fases (sólida e gás) são tratadas como fases contínuas, que se interpenetram (AHUJA & PATWARDHAN, 2008; SUN & BATTAGLIA, 2006; TAGHIPOUR, ELLIS & WONG, 2005; VAN WACHEM et al., 2001).

O modelo lagrangeano tem limitações para simulações de processos de fluidização em escala industrial. Isto é devido à simulação demandar elevado esforço computacional, porque no modelo lagrangeano o eixo de coordenadas está fixado nas partículas. No entanto é eficiente para simular experimentos de laboratório, onde o número de partículas é pequeno e o comportamento individual das partículas pode ser verificado (TSUJI, KAWAGUSHI & TANAKA, 1993).

O modelo euleriano é mais eficiente para simulação de processos em escala industrial por calcular o comportamento de um conjunto de partículas. Aqui o eixo de coordenadas é fixo em um ponto do reator e o movimento do conjunto de partículas é

caracterizado a partir desse eixo. Alguns trabalhos de leito fluidizado serão agora resumidos cronologicamente com o intuito de fornecer uma evolução no estudo do equipamento e do fenômeno.

Ding e Gidaspow estudaram a fluidização borbulhante usando a teoria cinética do escoamento granular com interesse de determinar o desgaste de tubos internos de combustores de leito fluidizado. Fato que está relacionado à circulação de sólidos, ao movimento de bolhas e a frequência e oscilação da porosidade no leito. Os resultados obtidos estavam de acordo com dados experimentais, visto que o modelo previu corretamente medidas experimentais para a porosidade em leito fluidizado em duas dimensões (DING & GIDASPOW, 1990).

Tsuji, Kawagushi e Tanaka simularam um leito fluidizado em duas dimensões utilizando simulação discreta da partícula e narram que este método é eficiente para simular principalmente escoamentos sólido-fluido e necessita de computadores com muita memória e alta velocidade de cálculo para que seja possível usar um grande número de partículas. A principal vantagem do uso do método de elementos distintos (DEM) é a capacidade de determinar características das partículas, visto que cada partícula é tratada no modelo individualmente. Com isso é possível determinar parâmetros entre partículas e as propriedades dos materiais, tais como, razão de Poisson, Módulo de Young e coeficiente de restituição (TSUJI, KAWAGUSHI & TANAKA, 1993).

Ichiki e Hayakawa simularam sem utilizar parâmetros empíricos a hidrodinâmica de leito fluidizado e observaram a formação de bolhas e escoamento lento "slug". As complexidades de sistemas granulares, tais como interação direta entre as partículas, poli dispersão, reação química foram negligenciadas. Os resultados mostraram que na região de escoamento lento "slug" a configuração das partículas se aproximavam de um leito empacotado e as partículas eram imóveis em regiões concentradas. Enquanto que, na

região diluída as partículas caem monotonicamente (ICHIKI & HAYAKAWA, 1995).

Hoomans e colaboradores simularam a formação de bolhas e escoamento lento “slug” utilizando aproximação de esfera rígida, onde as forças de interação são assumidas como impulsivas e, então, as partículas só trocam momento por meio de colisões. A formação de bolhas foi observada, no entanto, elas não eram estáveis e alguns centímetros acima do ponto de injeção no fundo elas estouravam. Analisando a sensibilidade perceberam que dois parâmetros chave para os resultados do modelo eram os coeficientes de restituição e fricção, que são características da partícula e são termos importantes para a geração de momento (HOOMANS et al., 1996).

Kawaguchi, Tanaka e Tsuji compararam simulações em modelos de leito fluidizado em 2D e 3D analisaram várias variáveis de processo como, efeito da velocidade do gás, efeito do coeficiente de fricção e etc. Concluíram que a principal diferença entre modelos em 2D e 3D está no começo da fluidização, mas que no entanto o padrão de escoamento dos dois modelos concordavam exceto pelo movimento das partículas nos cantos. No modelo em 2D as partículas também se moviam, enquanto que no 3D as partículas não se moviam próximas ao canto o que concordava com dados experimentais (KAWAGUCHI, TANAKA & TSUJI, 1998). A comparação de resultados em 2 e 3D são de relevância para a evolução dos modelos, pois se pode determinar a eficiência e qualidade obtidas além de determinar a necessidade de se evoluir para modelos mais complexos e completos.

Helland, Occelli e Tadríst simularam a formação de “clusters”, ou seja, a aglomeração de partículas que faz com que um grupo de partículas caia em queda livre fazendo assim uma movimentação do leito. Foi utilizado um modelo lagrangeano e as partículas foram assumidas como tendo interação binária, instantânea, não frontal e colisões inelásticas com fricção. O principal parâmetro analisado foi

a função da porosidade considerando o efeito do grupo de partículas na estrutura global e local do escoamento em duas dimensões. A fluidização foi instável para pequenas perturbações de porosidade devido à função de arraste ser não linear e induzir a formação de aglomerados “clusters”. A presença de aglomerados deu ao sopro um importante movimento de flutuação anisotrópico de ambas as fases (HELLAND, OCCELLI & TADRIST, 2000). Um resultado obtido através do trabalho citado acima pode ser visto na figura 1.2.4.

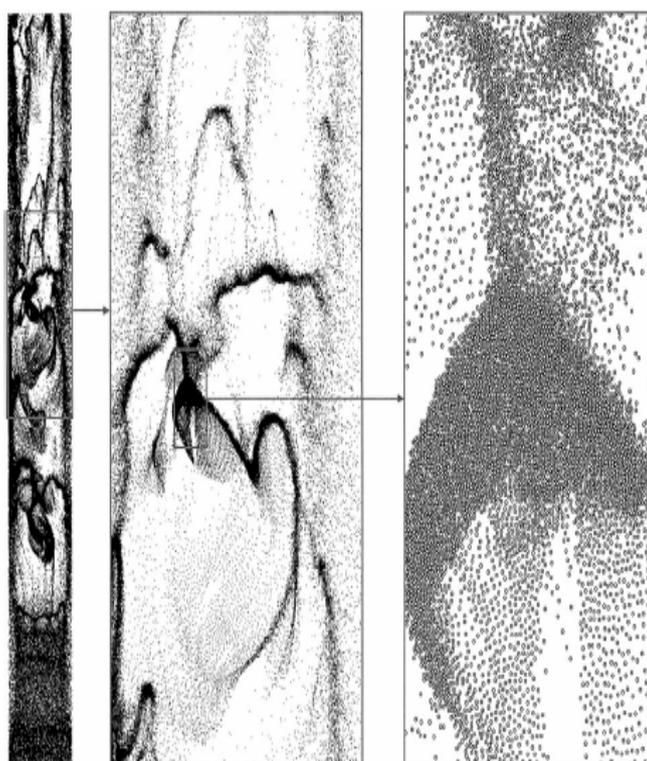


Figura 1.2.4. Exemplo da simulação de Helland mostrando a formação de cluster em leito fluidizado. (HELLAND, OCCELLI & TADRIST, 2000)

Yuu, Umekage e Johno simularam a formação, o crescimento, subida e desintegração de bolhas que é uma das tarefas mais difíceis na pesquisa de leito fluidizado. Utilizando método dos elementos distintos (DEM) concluíram que o modelo conseguia simular as características das bolhas, mas bolhas que estouravam perto do topo da superfície do leito poderiam causar uma elutriação se altas velocidades de subida das partículas fossem desenvolvidas (YUU,

UMEKAGE & JOHNO, 2000). A figura 1.2.5 mostra resultados obtidos a partir deste trabalho.

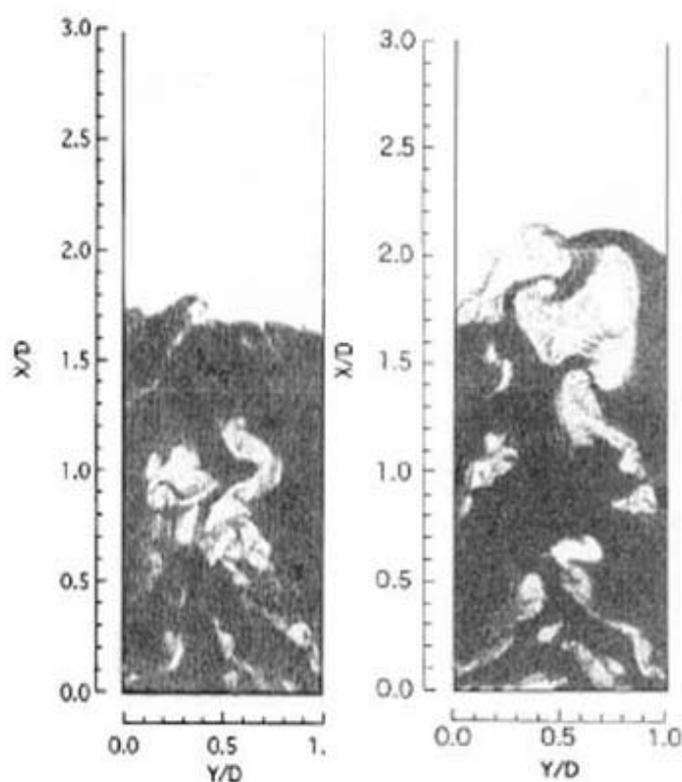


Figura 1.2.5. Resultados do modelo de Yuu mostrando a formação de bolhas em leito fluidizado. (YUU, UMEKAGE & JOHNO, 2000)

Goldschmidt, Kuipers e van Swaaij analisaram o efeito do coeficiente de restituição na dinâmica do leito utilizando o conceito de multifluido (CFD) com a teoria cinética de escoamento granular. Concluíram que a hidrodinâmica de leitos fluidizados está fortemente ligada a quantidade de energia dissipada nas colisões partícula-partícula. Então, para obter resultados realistas de modelos hidrodinâmicos fundamentais é de suma importância o conhecimento do efeito da dissipação de energia entre partículas (GOLDSCHMIDT, KUIPERS & van SWAAIJ, 2001).

Taghipour, Ellis e Wong simularam, utilizando mecânica do meio contínuo, uma coleção de partículas que foram consideradas idênticas e tendo diâmetro e densidade representativos. O modelo é multifluido (CFD) para a fase gasosa e sólida, considerando a

cinética do escoamento granular, a qual considera a energia de flutuação do sólido. A associação do conceito de multifluido a teoria cinética mostrou-se capaz de prever o comportamento do leito fluidizado. A comparação dos resultados com dados experimentais mostrou-se de acordo, pois os padrões apresentados para as variáveis analisadas apresentaram boa concordância (TAGHIPOUR, ELLIS & WONG. 2005). Os resultados obtidos neste trabalho podem ser vistos na figura 1.2.6 abaixo.

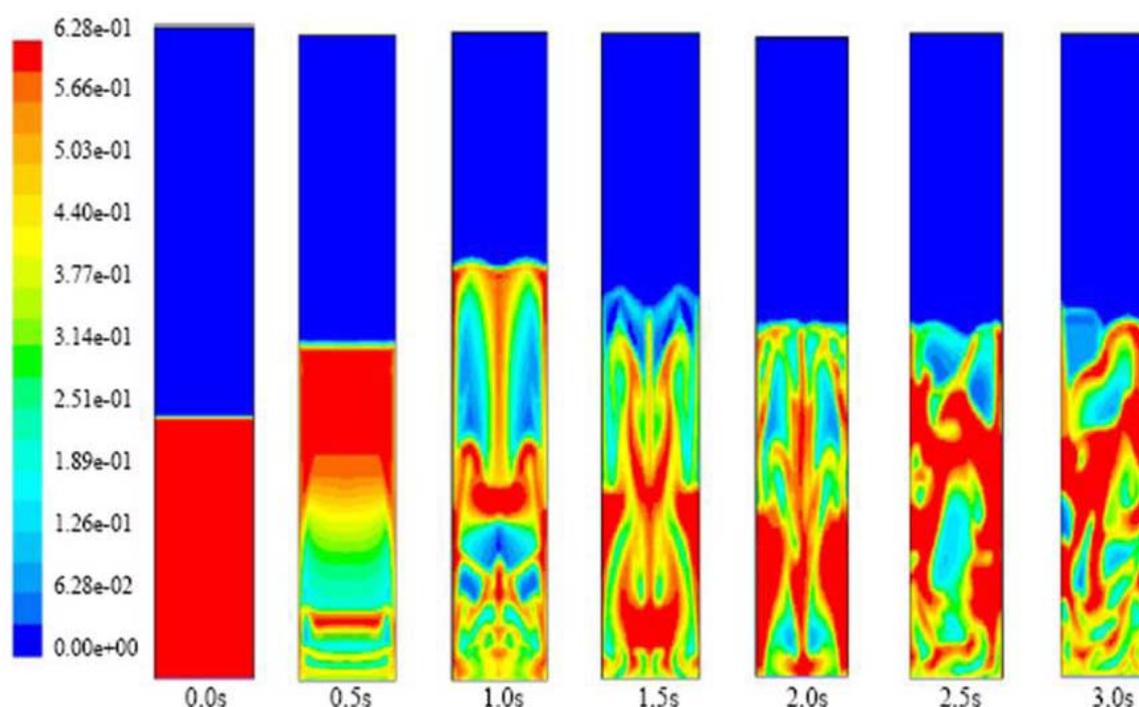


Figura 1.2.6. Resultados Obtido por Taghipour para a fração volumétrica de um leito em 2D. (TAGHIPOUR, ELLIS & WONG. 2005)

Glicksman e colaboradores analisaram o modo como as partículas se dispersam e se misturam com o material que é carregado por cima do leito utilizando um modelo em uma escala de $\frac{1}{4}$ de um combustor de leito fluidizado borbulhante. Os resultados obtidos utilizando o modelo apresentam-se estatisticamente relevantes para a mistura e os testes podem ser repetidos facilmente sem a separação prévia das fases particuladas no leito. A velocidade do gás é tida como um parâmetro chave para o comportamento das

bolhas no leito e, a análise da geometria é tida como parâmetro a ser investigado para alcançar a perfeita análise do comportamento de mistura no leito. (GLICKSMAN, CARR & NOYMER, 2008)

Hadavand e colaboradores aplicaram um modelo de controle robusto baseado em desigualdades de matrizes lineares com o objetivo de controlar a temperatura pelos parâmetros de entrada como: taxa de alimentação de carvão e velocidade de fluidização. O controlador proposto visa manter a temperatura em uma faixa para compensar distúrbios ou oscilações causadas nos parâmetros de operação do modelo. O modelo utilizado se baseia nas equações de conservação da massa e energia, as quais apresentam um comportamento complexo devido as não-linearidades fato que dificulta o desenvolvimento de um modelo que compreenda toda a dinâmica do sistema. (HADAVAND, JALALI & FAMOURI, 2008)

Outro ponto da abordagem de combustores de leito fluidizado são os modelos das reações envolvidas no processo. Vários modelos reacionais têm sido desenvolvidos para o fenômeno de fluidização. Pesquisadores têm averiguado o comportamento reacional dos diversos materiais que podem ser queimados (LOEFFLER & HOFBAUER, 2002; GUNGOR, 2007). Nutrido como principais preocupações no desenvolvimento de modelos reacionais as emissões de compostos nitrogenados e sulfurosos. A emissão de NO_x é comum com a utilização de combustíveis alternativos, no caso em questão a utilização de carvões com baixo teor de carbono e biomassa, essas emissões são inevitáveis. Fato este que é mais pronunciado para a combustão de PCI e acima de $1200\text{ }^\circ\text{C}$ (YUNHAN et al., 2006; NGAMPADIT, PIUMSOMBOON & SAJJAKULNUKIT, 2004; PERRY et al., 2000; SMOOT, 1997).

A presença de substâncias aromáticas nitrogenadas é comum em carvões com baixo grau de carbonificação. Daí a necessidade de se preocupar com essa emissão e às questões ambientais. Vários modelos cinéticos têm sido propostos para as reações de nitrogênio e alguns serão apresentados a seguir para uma breve demonstração

dos estudos cinéticos de formação de NO_x . (YUNHAN et al., 2006; ZHOU, FLAMANT & GAUTHIER. 2004 b; LOEFFLER et al., 2001; PERRY et al., 2000)

Xu, Smoot e Hill utilizando um pacote Fortran de cinética química para análise da fase gasosa (ChemKim) simularam a injeção de compostos como amônia e uréia para redução de NO_x . Nestes estudos obtiveram uma considerável redução na emissão desses gases propondo alguns mecanismos de reação. Neste trabalho foi proposto um método preditivo para a redução de NO_x em sistemas de combustão turbulenta. O mecanismo proposto foi um mecanismo reduzido, cujos resultados apresentam boa concordância com mecanismos completos na região dos parâmetros aplicados (XU, SMOOT & HILL, 1998).

Perry e colaboradores propuseram um mecanismo global de radical livre e associaram a taxa de equação para evolução de gases de nitrogênio durante a devolatilização do carvão. Esse mecanismo propõe o desaparecimento de nitrogênios aromáticos de aglomerados utilizando uma taxa de equação predita de primeira ordem (etapa lenta), para variações com tempo, temperatura, taxa de aquecimento e teor de carbono do carvão (PERRY et al., 2000).

Zhou, Flamant e Gauthier simularam as emissões de diversos gases provenientes da queima do carvão no leito. Pode-se verificar o comportamento dos gases O_2 , CO , CO_2 , NO e N_2O e ver onde suas concentrações são maiores e como estes se comportam no reator (ZHOU, FLAMANT & GAUTHIER. 2004 b).

A emissão de compostos sulfurosos é um grande problema quando se utiliza combustíveis fósseis, como exemplo cita-se o carvão queimado em plantas convencionais de combustão para geração de energia (MIURA et al., 2001).

As emissões de SO_2 se destacam, por causarem problemas ambientais e à saúde humana e essas emissões são provenientes principalmente da combustão de carvões com baixo teor de carbono e elevado teor de enxofre. Na atmosfera em presença de umidade o

SO₂ emitido se converte em ácido sulfúrico após a condensação no ar e retorna como a chuva ácida. (HOU et al., 2005; MIURA et al., 2001; HAYVANOVICH & PYSH'YEV, 2003; XU & KUMAGAI, 2003) Estudos variados têm se desenvolvido para averiguar o comportamento substâncias provenientes da queima desses combustíveis e os mecanismos de formação das mesmas. Segundo Miura e outros pesquisadores o enxofre no carvão é proveniente de duas fontes. Uma inorgânica constituída basicamente de pirita (FeS₂) e sulfonatos. Outra orgânica que constitui cerca de 30 a 50% do enxofre total. Esta fase é constituída de sulfetos, dissulfetos, tióis e tiofenos, mas é geralmente, por conveniência, agrupada como enxofre alifático, enxofre aromático e tiofenos (XU & KUMAGAI, 2003; MIURA et al., 2001; GARCÍA-LABIANO, HAMPARTSOUMIAN & WILIAMS, 1995). Um grânulo de pirita incrustado na matéria carbonosa pode ser visto na figura 1.2.7, enquanto uma estrutura esquemática das moléculas constituintes do carvão pode ser vista na figura 1.2.8.

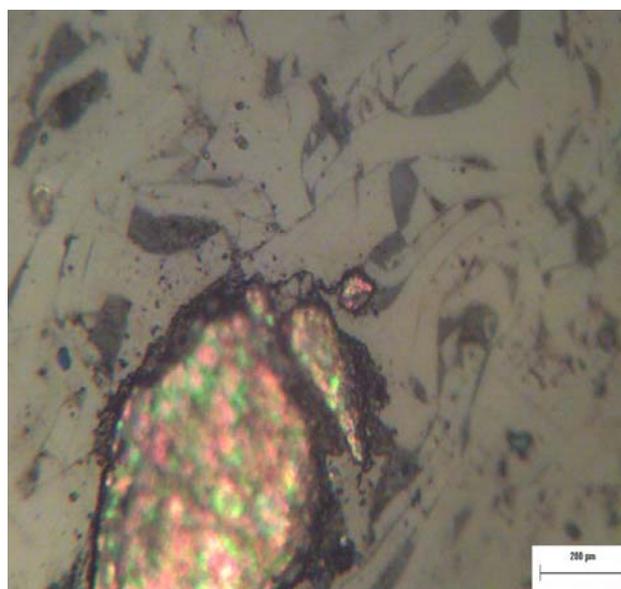


Figura 1.2.7. Micrografia mostrando um grânulo de pirita incrustado na matéria carbonosa.

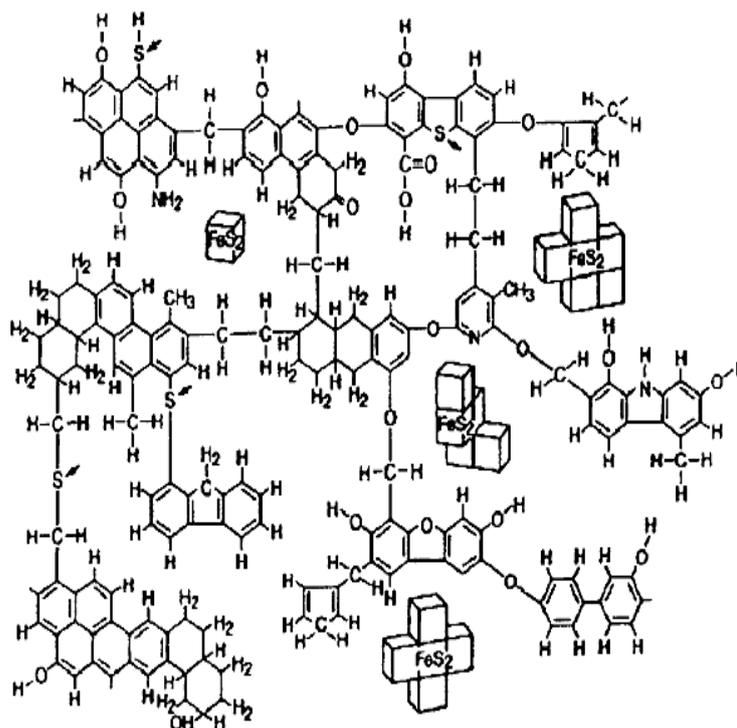


Figura 1.2.8. Representação da composição de uma molécula de carvão. (PRAYUENYONG, 2002)

A emissão de SO_2 pode causar problemas ambientais e à saúde humana. Essas emissões são provenientes principalmente da combustão de carvões com baixo grau de carbonificação e elevado teor de enxofre. (SHUYAN et al., 2008; HOU et al. 2005)

O alto teor de enxofre contido em carvões utilizados para geração de energia favorece a emissão, principalmente, de SO_2 , que pode ser convertido em ácido sulfúrico após a condensação no ar, e este ácido juntamente com outras substâncias constituem o fenômeno conhecido como a chuva ácida, que afeta a saúde humana, destrói florestas, monumentos históricos e etc. (HAYVANOVICH & PYSH'YEV, 2003)

Devido ao aumento da utilização de carvões de baixo “rank” e elevado teor de enxofre, nos mais variados processos e os problemas causados pelas substâncias emitidas durante a queima desses carvões, estudos variados têm se desenvolvido para averiguar o comportamento dessas substâncias e os mecanismos de

formação das mesmas. (GRUBOR, MANOVIC & OKA, 2003; HAN et al., 2001; ADÁNEZ et al., 1996)

O modelo da cinética da pirita (FeS_2) proposto por Srinivasachar e Boni, propõe a taxa da reação da partícula considerando várias resistências. O modelo desenvolvido é capaz de prever o comportamento da pirita em ambiente de combustão, considerando as transformações da pirita até a hematita (Fe_2O_3), no entanto, este modelo necessita ser clarificado, incluindo principalmente a cinética intrínseca da pirita e as limitações da difusão do oxigênio no poro devido mudanças de fases durante a combustão (SRINIVASACHAR & BONI, 1989).

Segundo Miura e colaboradores O enxofre no carvão é proveniente de duas fontes. Uma inorgânica constituída de pirita (FeS_2) e sulfonatos. Outra orgânica que constitui cerca de 30 a 50% do enxofre total. Esta fase é constituída de sulfetos, dissulfetos, tióis e tiofenos, mas é geralmente, por conveniência, agrupada como enxofre alifático, enxofre aromático e tiofenos. Através de análise termogravimétrica, descobriram que enxofres alifáticos se decompunham em temperaturas de 500°C e que os aromáticos entre $400\text{-}700^\circ\text{C}$ independente do tipo de carvão (MIURA et al., 2001).

Hou e colaboradores realizaram experimentos em planta piloto de reator de leito fluidizado borbulhante para explorar um novo processo de dessulfuração a seco, utilizando NO_2 como gás de injeção e um preparado de cinzas e calcário. Vários parâmetros de operação foram testados para temperaturas de $523\text{-}673\text{K}$, as análises mostraram que o efeito chave para a dessulfuração era a conversão do cálcio adicionado para reagir com o SO_2 formado e a principal substância formada foi o sulfato de cálcio CaSO_4 (HOU et al., 2005).

Gungor e Eskin analisaram os benefícios ambientais da combustão em leito fluidizado utilizando um modelo unidimensional. As emissões de CO , CO_2 , SO_2 , NO foram analisadas levando-se em consideração o comportamento desta substância variando parâmetros, tais como, diâmetro da partícula, velocidade do gás,

excesso de ar. Os resultados obtidos foram comparados com um leito em escala piloto e mostraram-se de acordo. No modelo foram consideradas existentes e em separado as fases bolha e emulsão para o comportamento fluidodinâmico no reator. Concluíram que a partir da combustão em reator de leito fluidizado pode se obter um processo mais limpo e ambientalmente saudável. (GUNGOR & ESKIN, 2007)

Zhong e colaboradores, utilizaram um modelo euleriano em 3D para simular o comportamento de um leito fluidizado a alta pressão e temperatura utilizando para implementação a teoria cinética do escoamento granular. A fase gasosa foi modelada utilizando o modelo k- ϵ de turbulência variações dos parâmetros operacionais do modelo foram simuladas. Os resultados obtidos mostraram-se condizentes com o que se esperava, pois a penetração do jato de ar pode ser analisada e conclusões puderam ser tiradas a respeito do fenômeno. O modelo Euleriano, com a teoria cinética foi de extrema importância para o desenvolvimento do modelo, visto que o escoamento tem um comportamento complexo. (ZHONG et al., 2007)

Shuyan e colaboradores simularam o efeito da formação de aglomerados de partículas de óxido de cálcio na retenção do SO₂ e emissão de NO. O modelo contempla a hidrodinâmica e as reações químicas envolvidas no processo analisando principalmente a retenção de uma partícula isolada e de aglomerados de partículas. Perceberam com isso que a retenção do enxofre está relacionada à porosidade do aglomerado e que a captura individual é maior para partículas isoladas que para as aglomeradas. As simulações conduzidas para um aglomerado simples mostraram-se promissoras para a retenção do SO₂ e a emissão de NO pode ser reduzida com esta técnica, mas aumenta com a velocidade do gás e temperatura. (SHUYAN et al., 2008)

Gungor e Eskin utilizando um modelo em 2D analisaram a hidrodinâmica, a transferência de calor e os aspectos da combustão. As emissões de gases da combustão foram analisadas para

diferentes tipos de carvão e parâmetros operacionais. A emissão de NO_x diminui com a velocidade operacional do leito, enquanto a de SO_2 diminui determinando que dos parâmetros analisados a velocidade é o mais importante. (GUNGOR & ESKIN, 2008)

Capítulo 2: Metodologia

2.1- Modelamento matemático

Esta tese consiste no desenvolvimento de um modelo matemático capaz de considerar a fluidodinâmica do processo de fluidização em reator de leito fluidizado. Acrescentando, após esta etapa modelos cinéticos que considerem a combustão de carvão mineral. Após ser completado o mesmo poderá ser expandido para contemplar a injeção de diversos tipos de combustíveis fósseis, tais como biomassa, lixo e alguns resíduos industriais, agrícolas e etc. As equações diferenciais parciais do modelo necessitam ser discretizadas para serem resolvidas para uma malha não ortogonal. A elas necessitam ser introduzidas condições iniciais e de contorno para que numericamente sejam resolvidas pelo método de volumes finitos para uma malha estruturada irregular com um sistema não ortogonal. As equações algébricas discretizadas são resolvidas iterativamente pelo método linha por linha (ADI) usando um algoritmo de solução para uma matriz tri-diagonal.

O acoplamento da fase gasosa é tratado usando o algoritmo SIMPLE com uma malha deslocada. Essas equações são resolvidas em um complexo código computacional utilizando software Fortran 90/95. O modelamento segue o desenvolvido por Castro (CASTRO, 2000) e será utilizado para o trabalho a ser desenvolvido para um leito fluidizado. Este modelo será utilizado, por se tratar de um

modelo já testado e conhecido. No entanto este deverá sofrer alterações para contemplar a fenomenologia de um leito fluidizado. A metodologia de cálculo, no entanto, não sofrerá alteração as mudanças a serem feitas dizem respeito às equações que representa a fluidodinâmica de um combustor de leito fluidizado. Esta técnica não é nova e vários pesquisadores têm estudado o comportamento deste fenômeno. O modelamento deste processo, no entanto, não é algo simples de ser feito devido, sobretudo ao grande caráter não-linear das equações envolvidas. A dificuldade de simular este tipo de fenômeno devido à complexidade das equações envolvidas leva muitos autores a se prenderem a apenas um tipo de fenômeno, ou seja, fluidodinâmica ou cinética, raramente os dois juntos. Quando são analisados em conjunto, esses fenômenos não abrangem toda a complexidade deles, isto quer dizer que não são analisados de forma completa, por exemplo, se analisa apenas algumas reações e não todas envolvidas no processo. O modelo que está sendo proposto visa preencher esta lacuna, averiguando de forma completa a fluidodinâmica e a cinética de um grande número de reações que podem ocorrer durante a combustão de carvão em leito fluidizado. A modelagem matemática segue a hipótese de meio contínuo e, como tal pode ser expresso por equações de transporte de massa, momento e energia. Os fenômenos de transferência de massa, momento e energia, no interior do reator podem ser representados pela equação geral do transporte (equação 2.1.1).

$$\frac{\partial(\varepsilon_i \rho_i \phi_i)}{\partial t} + \text{div}(\varepsilon_i U_i \phi_i) = \text{div}(\varepsilon_i \Gamma_{\phi_i} \text{grad} \phi_i) + S_{\phi_i} \quad 2.1.1$$

Onde, o subscrito (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 momento, 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 mineral, 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 2.1.1 abaixo:

Tabela 2.1.1: Fases e componentes considerados no modelo matemático.

Gás	CO, CO ₂ , O ₂ , H ₂ , H ₂ O, N ₂ , NO, NO ₂ , N ₂ O, SO, SO ₂ , SiO
Carvão	C, SiO ₂ , Voláteis, SiC, Al ₂ O ₃ , MgO, CaO, FeS ₂ , Fe ₂ O ₃ , CaSO ₄
Biomassa	C, SiO ₂ , Voláteis, SiC, Al ₂ O ₃ , MgO, CaO

2.2- Termos Fonte

Termo fonte S_{ϕ} representa a geração ou consumo de energia, massa e momento 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 às reações químicas e transformação de fases. Fontes de Momento 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 o fenômeno de transferência de massa, devido às reações químicas e transformações de fase segundo apresentado por (CASTRO, 2000). Nos termos-fontes são consideradas, por exemplo, os fenômenos de interações entre as fases e interações mecânicas, as quais resultam no acoplamento entre as equações de conservação de massa, momento e energia.

2.2.1- Fontes das equações de massa

Como dito anteriormente fontes de massa surgem de reações químicas e transformações de fases durante o processo. A tabela 2.2.1 mostra as fontes relacionadas às espécies químicas analisadas no modelo, onde S é o termo fonte de geração ou consumo de massa, M é a massa molecular de cada substância e R a taxa reacional de geração ou consumo da espécie química em questão. Nesta seção serão apresentadas, também, as reações químicas e as respectivas equações de taxa reacional para cada reação analisada no modelo de combustão de carvão em reator de leito fluidizado.

Tabela 2.2.1: Termos fonte para as frações mássicas das espécies químicas.

Componentes	Termos Fonte
CO	$S_{CO} = M_{CO} \sum R$
CO ₂	$S_{CO_2} = M_{CO_2} \sum R$
H ₂	$S_{H_2} = M_{H_2} \sum R$
H ₂ O	$S_{H_2O} = M_{H_2O} \sum R$
N ₂	$S_{N_2} = M_{N_2} \sum R$
O ₂	$S_{O_2} = M_{O_2} \sum R$
SiO	$S_{SiO} = M_{SiO} \sum R$
SiO ₂	$S_{SiO_2} = M_{SiO_2} \sum R$
Al ₂ O ₃	$S_{Al_2O_3} = -M_{Al_2O_3} \sum R$

CaO	$S_{CaO} = M_{CaO} \sum R$
MgO	$S_{MgO} = -M_{MgO} \sum R$
MV	$S_{MV_{PC}} = -M_{MV_{PC}} \sum R$
C	$S_{C_{PC}} = -M_{C_{PC}} \sum R$
SiC	$S_{SiC} = -M_{SiC} \sum R$
FeS ₂	$S_{FeS} = -M_{FeS_2} \sum R$
Fe ₂ O ₃	$S_{Fe_2O_3} = M_{Fe_2O_3} \sum R$
CaSO ₄	$S_{CaSO_4} = M_{CaSO_4} \sum R$
SO ₂	$S_{SO_2} = M_{SO_2} \sum R$
SO	$S_{SO} = M_{SO} \sum R$

A oxidação do carbono ocorre de duas formas: a primeira é a combustão parcial, que produz CO; a segunda é a combustão total, que produz CO₂. As reações de (“Solution Loss”) reação 3 e a reação de gás d’água reação 4 consomem carbono, enquanto prosseguem, onde a temperatura do gás está na faixa de 850-900°C. As taxas de reação de (“solution loss”) e gás d’água usam troca por difusão e controle cinético. A reação de vaporização da umidade “water gas shift” reação 5 é a 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 equacionada de acordo com o modelo de (CASTRO, 2000).

Combustão	
(1)	$C_{PC} + 1/2O_{2(g)} \rightarrow CO_{(g)}$
(2)	$C_{PC} + O_{2(g)} \rightarrow CO_{2(g)}$
$R_{(1)PC} = \frac{a}{1+a} R_{ave}; \quad R_{(2)PC} = \frac{1}{1+a} R_{ave}; \quad R_{ave} = \left(\frac{\varepsilon_g \rho_g \omega_{O_2(g)}}{M_{O_2}} \right) \left\{ \frac{d_i \varphi_i}{A_i D_{O_2, \omega_2}^{T_{ave}}} + \frac{1}{\eta k_{ave}} \right\}^{-1}$ $a = 2500 \exp\left(-\frac{12400}{1.9877T_i}\right); \quad k_{ave} = 7260RT_g \exp\left(-\frac{17980}{T_{ave}}\right); \quad T_{ave} = \frac{T_g + T_i}{2}; \quad A_i = \frac{6\varepsilon_i}{d_i \varphi_i};$ $\eta = \left[\frac{d_i}{6} \sqrt{\frac{k_{ave} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}}}} \right]^{-1} \left\{ \left[\tanh\left(\frac{d_i}{6} \sqrt{\frac{k_{ave} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}}}} \right) \right]^{-1} - \left[\frac{d_i}{2} \sqrt{\frac{k_{ave} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}}}} \right]^{-1} \right\}; \quad \delta_{pc} = 1; \quad \zeta_{pc} = 0.2$	

Bourdourd (Solution Loss)	
(3)	$C_{PC} + CO_{2(g)} \rightarrow 2CO_{(g)}$
$R_{(3)} = \frac{\rho_g \omega_{CO_2(g)}}{M_{CO_2}} \left(\frac{1}{A_i k_{film, CO_2}} + \frac{1}{\eta k_{(3)}} \right)^{-1}$ $k_{(3)} = \frac{k_1}{1 + k_2 P_{CO} + k_3 P_{CO_2}} \rho_i \varepsilon_i \omega_i \quad 82,056 \times 10^{-3} T_g; \quad k_1 = \frac{1}{60} \exp\left(19,875 - \frac{66350}{1,9877T_i}\right);$ $k_2 = \exp\left(-6,688 + \frac{21421}{1,9877T_i}\right); \quad k_3 = \exp\left(31,615 - \frac{88168}{1,9877T_i}\right);$ $P_{\omega_j} = \frac{82,056 \times 10^{-3} \rho_g T_g \omega_j}{M_{\omega_j}}; \quad (j=CO, CO_2); \quad k_{film, CO_2} = D_{CO_2, N_2}^{T_{ave}} \frac{Sh_i}{d_i \varphi_i};$ $\eta = \left[\frac{d_i}{6} \sqrt{\frac{k_{10_i} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}}}} \right]^{-1} \left\{ \left[\tanh\left(\frac{d_i}{6} \sqrt{\frac{k_{10_i} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}}}} \right) \right]^{-1} - \left[\frac{d_i}{2} \sqrt{\frac{k_{10_i} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}}}} \right]^{-1} \right\}; \quad A_i = \frac{6\varepsilon_i}{d_i \varphi_i};$ $T_{ave} = \frac{T_g + T_i}{2}; \quad \delta_{pc} = 1; \quad \zeta_{pc} = 0,2$	

Reação com gás d'água	
(4)	$C_{PC} + H_2O_{(g)} \rightarrow CO_{(g)} + H_2_{(g)}$

$$R_{(4)} = \frac{\rho_g \omega_{H_2O(g)}}{M_{H_2O}} \left(\frac{1}{A_i k_{film,H_2O}} + \frac{1}{\eta k_{(4)}} \right)^{-1}$$

$$k_{(4)} = \frac{k_4}{1 + k_2 P_{CO} + k_3 P_{CO_2} + k_5 P_{H_2O}} \omega_{C(i)} \rho_i \varepsilon_i 82,056 \times 10^{-3} T_g; \quad k_{film,H_2O} = D_{H_2O,N_2}^{T_{ave}} \frac{Sh_i}{d_i};$$

$$Sh_i = 1,5 Re_g^{0,55}; \quad k_2 = 10,3 \frac{M_{H_2O}}{M_{CO}}; \quad k_3 = \frac{M_{H_2O}}{M_{CO_2}} \exp\left(14,24 - \frac{18350}{T_i}\right); \quad A_i = \frac{6 \varepsilon_i}{d_i \varphi_i};$$

$$k_4 = \frac{1}{3600 M_C} \exp\left(22,35 - \frac{26320}{T_i}\right); \quad k_5 = \exp\left(29,59 - \frac{36760}{T_i}\right);$$

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

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

Reação "Water gas shift"	
(5)	$CO_{2(g)} + H_{2(g)} \leftrightarrow CO_{(g)} + H_{2O(g)}$
$R_{(5)} = \frac{1000}{(101325)^2} \varepsilon_s (f_{PC}) k_{(5)} \left(P_{CO} P_{H_2O} - \frac{P_{CO} P_{H_2O}}{k_{(5)}} \right)$ $P_{\omega_j} = \frac{82,056 \times 10^{-3} \rho_g T_g \omega_j}{M_{\omega_j}}; \quad k_{(5)} = \exp\left(-3,5414 + \frac{3863,7}{T_i}\right)$ $k_{(5)} = \alpha k_1 + (1 - \alpha) k_3, \quad \text{para,} \quad \left(P_{CO} P_{H_2O} - \frac{P_{CO_2} P_{H_2}}{K_{12}} \right) \geq 0; \quad \text{e,}$ $k_{(5)} = [\alpha k_2 + (1 - \alpha) k_4] k_{(5)}, \quad \text{para,} \quad \left(P_{CO} P_{H_2O} - \frac{P_{CO_2} P_{H_2}}{K_{12}} \right) < 0;$ $k_1 = 93,3 \exp\left(\frac{-7,32}{8,3146 \times 10^{-3} T_g}\right); \quad k_2 = 136 \exp\left(\frac{-7,75}{8,3146 \times 10^{-3} T_g}\right);$ $k_3 = 1,83 \times 10^{-5} \exp\left(\frac{7,84 \times 10^{-3}}{8,3146 \times 10^{-3} T_g}\right); \quad k_4 = 8,83 \times 10^{-2} \exp\left(\frac{4,56}{8,146 \times 10^{-3} T_g}\right)$	

O consumo da matéria volátil é decorrente de reações tanto com O_2 reação 6, quanto com CO_2 reação 7 e a estequiometria das reações dos voláteis depende da composição dos voláteis conforme

(CASTRO, 2000). A estequiometria das reações 6 e 7 são dadas por análise elemental do carvão pulverizado como se segue (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)	$Voláteis_{(pc)} + \alpha_5 CO_{2(g)} \rightarrow \alpha_6 CO_{(g)} + \alpha_7 H_{2(g)} + \alpha_8 N_{2(g)}$
$R_{(7)} = 23,6 \left(\frac{\mu_g \varepsilon_t}{\rho_g k_t} \right)^{1/4} \left(\frac{\varepsilon_t}{k_t} \right) \min \left(\varepsilon_{pc} \rho_{pc} \omega_{MVPC}, \varepsilon_g \omega_{CO_2} \frac{M_{MV}}{\alpha_5 M_{CO_2}} \right)$	
$k_t = (0.03 \bar{U}_g)^2$; $\varepsilon_t = \frac{k_t^{0.5}}{0.01}$	
Coefficientes Estequiométricos para a combustão dos voláteis	
$\delta = \frac{\omega_{C_{VM}}}{M_C} + \frac{\omega_{H_{VM}}}{M_H} + \frac{\omega_{O_{VM}}}{M_O} + \frac{\omega_{N_{VM}}}{M_N}$; $\alpha_1 = \frac{\omega_{C_{VM}}}{\delta M_C} + \frac{\omega_{H_{VM}}}{4\delta M_H} - \frac{\omega_{O_{VM}}}{2\delta M_O}$; $\alpha_2 = \frac{\omega_{C_{VM}}}{\delta M_C}$; $\alpha_3 = \frac{\omega_{H_{VM}}}{4\delta M_H}$; $\alpha_4 = \frac{\omega_{O_{VM}}}{2\delta M_O}$;	
$\alpha_5 = \frac{\omega_{C_{VM}}}{\delta M_C} - \frac{\omega_{O_{VM}}}{2\delta M_O}$; $\alpha_6 = \frac{\omega_{C_{VM}}}{\delta M_C} + \alpha_5$; $\alpha_7 = \frac{\omega_{H_{VM}}}{\delta M_H}$; $\alpha_8 = \frac{\omega_{N_{VM}}}{2\delta M_N}$	

Para a redução do silício são consideradas no modelo as reações abaixo. No entanto, essas reações não serão usadas no modelo presente, pois elas ocorrem a temperaturas acima de 900° C. A operação do combustor a ser utilizado no desenvolvimento deste trabalho é de 850° C. A temperatura de operação é determinada para garantir, não apenas uma boa operação do reator e manutenção do fenômeno de combustão, mas também para evitar que ocorra a fusão da sílica presente na areia que é o material sólido inicial do reator. Portanto, elas são apresentadas para o caso da operação do reator sob condições de temperaturas superiores à 850° C e, então os compostos formados possam ser também analisados. A redução da sílica é representada pelas reações (8, 9, 10).

Redução da sílica	
(8)	$SiO_{2(PC)} + C_{(PC)} \leftrightarrow SiO_{(g)} + CO_{(g)}$
$R_{\theta_8} = k_{\theta_8} \rho_{PC} \left(\frac{2273 - T_s}{200} \right) \left(\omega_{SiO_2(PC)} - \frac{P_{CO} P_{CO_2} / k_{\theta_8}}{M_{SiO_2}} \right)$ $k_{\theta_8} = 2 \times 10^4 \exp\left(\frac{-2,89 \times 10^5}{8,314 T_s}\right); K_{\theta_8} = \exp\left(17,957 - \frac{35896}{T_s}\right)$	
(9)	$SiO_{2(PC)} + 3C_{(PC)} \leftrightarrow SiC_{(g)} + 2CO_{(g)}$
$R_{\theta_9} = k_{\theta_9} \rho_{PC} \left(\frac{2273 - T_s}{200} \right)_0^1 \left(\frac{\omega_{SiO_2(PC)} - \omega_{SiC} P^2_{CO} / k_{\theta_9}}{M_{SiO_2}} \right)$ $k_{\theta_9} = 2,7 \times 10^4 \exp\left(\frac{-2,76 \times 10^5}{8,314 T_s}\right); K_{\theta_9} = \exp\left(17,760 - \frac{31600}{T_s}\right)$	
(10)	$SiC_{(PC)} + CO_{(g)} \leftrightarrow SiO_{(g)} + 2C_{(PC)}$
$R_{\theta_{10}} = k_{\theta_{10}} A_{PC} \rho_{PC} \left(\frac{\omega_{SiC}}{M_{SiC}} \right)$ $A_{PC} = \frac{6\varepsilon_{PC}}{d_{PC} \phi_{PC}}; k_{\theta_{10}} = 1,91 \times 10^6 \exp\left(\frac{-379000}{8,314 T_s}\right)$	

Quando combustível sólido é alimentado em reator de leito fluidizado as partículas são submetidas a vários processos que ocorrem simultaneamente. Dentre estes podem se destacar secagem, evolução dos voláteis e combustão, combustão do carbono (gaseificação). Estes fatos são influenciados pela fluidodinâmica do reator, propriedades dos combustíveis, enriquecimento de oxigênio e temperatura do leito (ZHOU, FLAMANT, GAUTHIER, 2004).

As reações consideradas para o enxofre orgânico seguem os modelos das reações de combustão do carbono citadas anteriormente, pois enxofres alifáticos se decompõem em temperaturas de 500° C, enquanto que os aromáticos em temperatura na faixa de 400-700° C independentemente do tipo de carvão (MIURA et al., 2001). Essas reações podem ser vistas abaixo:

Combustão do Enxofre	
(18)	$[Org - S]_{PC} + 1/2O_{2(g)} \rightarrow SO_{(g)}$
(19)	$[Org - S]_{PC} + O_{2(g)} \rightarrow SO_{2(g)}$
$R_{(18)PC} = \frac{a}{1+a} R_{ave}; \quad R_{(19)PC} = \frac{1}{1+a} R_{ave}; \quad R_{ave} = \left(\frac{\varepsilon_g \rho_g \omega_{O_2(g)}}{M_{O_2}} \right) \left\{ \frac{d_i \varphi_i}{A_i D_{O_2, O_2}^{T_{ave}} Sh_i} + \frac{1}{\eta k_{ave}} \right\}^{-1}$ $a = 2500 \exp\left(-\frac{12400}{1.987T_i}\right); \quad k_{ave} = 7260RT_g \exp\left(-\frac{17980}{T_{ave}}\right); \quad T_{ave} = \frac{T_g + T_i}{2}; \quad A_i = \frac{6\varepsilon_i}{d_i \varphi_i};$ $\eta = \left[\frac{d_i}{6} \sqrt{\frac{k_{ave} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}}}} \right]^{-1} \left\{ \left[\tanh\left(\frac{d_i}{6} \sqrt{\frac{k_{ave} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}}}} \right) \right]^{-1} - \left[\frac{d_i}{2} \sqrt{\frac{k_{ave} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}}}} \right]^{-1} \right\}; \quad \delta_{pc} = 1; \quad \zeta_{pc} = 0.2$	

Reação entre o Enxofre orgânico e SO₂	
(20)	$[Org - S]_{PC} + SO_{2(g)} \rightarrow 2SO_{(g)}$
$R_{(20)} = \frac{\rho_g \omega_{SO_2(g)}}{M_{SO_2}} \left(\frac{1}{A_i k_{film, SO_2}} + \frac{1}{\eta k_{(20)}} \right)^{-1}$ $k_{(20)} = \frac{k_1}{1 + k_2 P_{CO} + k_3 P_{CO_2}} \rho_i \varepsilon_i \omega_i \cdot 82,056 \times 10^{-3} T_g; \quad k_1 = \frac{1}{60} \exp\left(19,875 - \frac{66350}{1,987T_i}\right);$ $k_2 = \exp\left(-6,688 + \frac{21421}{1,987T_i}\right); \quad k_3 = \exp\left(31,615 - \frac{88168}{1,987T_i}\right);$ $P_{\omega_j} = \frac{82,056 \times 10^{-3} \rho_g T_g \omega_j}{M_{\omega_j}}; \quad (j=SO, SO_2); \quad k_{film, SO_2} = D_{SO_2, N_2}^{T_{ave}} \frac{Sh_i}{d_i \varphi_i}; \quad \delta_{pc} = 1; \quad \zeta_{pc} = 0,2$ $\eta = \left[\frac{d_i}{6} \sqrt{\frac{k_{10,i} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}}}} \right]^{-1} \left\{ \left[\tanh\left(\frac{d_i}{6} \sqrt{\frac{k_{10,i} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}}}} \right) \right]^{-1} - \left[\frac{d_i}{2} \sqrt{\frac{k_{10,i} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}}}} \right]^{-1} \right\}; \quad A_i = \frac{6\varepsilon_i}{d_i \varphi_i}; \quad T_{ave} = \frac{T_g + T_i}{2}$	

Para o enxofre inorgânico a substância considerada é a pirita (FeS₂) que é o mineral mais comumente encontrado no carvão na forma de grânulos, os quais estão normalmente dispersos na matéria orgânica. As transformações da pirita consideradas no modelo podem ser vistas a seguir e obedecem ao modelo proposto por Srinivasachar e Boni para as transformações da pirita em ambiente de combustão equações 21. (SRINIVASACHAR & BONI, 1989)

Oxidação da Pirita	
(21)	$FeS_{2(PC)} + O_{2(g)} \rightarrow Fe_3O_{4(S)} + SO_{(g)}$ $Fe_3O_{4(PC)} + O_{2(g)} \rightarrow Fe_2O_{3(S)}$
$R_{(21)} = k_i C_{O_2} + k_j C_{O_2} \mathcal{D}_{O_2}^{T_{ave}}$	
$k_i = 5 \times 10^7 \exp\left(\frac{-150000}{RT_{pc}}\right); k_j = 8.6 \times 10^{-3}$	

Os gases sulfurados gerados pela queima ou pela oxidação do enxofre podem ser capturados durante o processo utilizando óxido de cálcio (CaO) existente no meio ou pela alimentação deste no processo. O modelo utilizado segue o modelo proposto por Desroches-Ducarne e colaboradores, o qual pode ser visto abaixo representado pelo conjunto de reações 22.

Absorção de gases Sulfurados	
(22)	$SO_{2(PC)} + O_{2(g)} \rightarrow SO_{3(g)}$ $CaO_{(PC)} + SO_{3(g)} \rightarrow CaSO_{4(S)}$
$R_{(22)} = k C_{SO_3}$	
$k = 6,79 \times 10^2 \exp\left(\frac{-20000}{T_{pc}}\right)$	

Todas as reações apresentadas nesta seção constam na modelagem, no entanto algumas poderão não ser utilizadas, quer seja por opção do usuário do modelo ou por fatores do processo como, por exemplo, temperatura na qual a reação ocorre.

2.2.2- Fontes das equações de energia

Os termos fonte de energia são apresentados na tabela 2.2.2 abaixo:

Tabela 2.2.2. Termos fonte de energia.

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

Fontes de energia surgem devido às reações químicas e transformações de fases, além da troca de calor sensível durante transferência de massa. A fonte de energia devido à transferência de calor convectivo é calculada pela equação 2.2.1:

$$\dot{E}_i^j = h_{i-j} A_{i-j} [T_i - T_j] \quad 2.2.1$$

O coeficiente de transferência de calor é calculado pela equação de Ranz-Marshall equação 2.2.2.

$$h_{g-i} = \frac{K_g}{d_i} [2,0 + 0,6 (\text{Re}_{g-i})^{0,5} (\text{Pr}_g)^{1/3}] \quad 2.2.2$$

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) equação 2.2.3.

$$A_{S-i} = \left(\frac{\varepsilon_i}{\varepsilon_g + \sum_{i \in \text{finos}} \varepsilon_i} \right) \left[A_S - \sum_{j \in \text{gás}} A_{S-j} \right] \quad 2.2.3$$

2.2.3- Fontes das equações de momento

Fontes de momento são provenientes das interações mecânicas entre as fases, arraste interfásico, gradientes de pressão ou

gravidade. Os termos fonte para conservação de momento para as fases são apresentados na tabela 2.2.3 abaixo:

Tabela 2.2.3. Termos fonte de momento.

Fases	Termos Fonte
Gás	$S_{\phi} = -grad [P_g] - \vec{F}_g^{PC} + grad \vec{\tau}_g$
Carvão e Biomassa	$S_{\phi} = -\vec{F}_{PC}^G - \rho_{PC} \varepsilon_{PC} \vec{g} - grad [P] + grad \vec{\tau}_s$

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

$$F_m = -C_{d_{g-s}} \left[\frac{3 \varepsilon_{PC} \rho_{PC}}{4 d_{PC} \varphi_{PC}} \right] [\vec{U}_g - \vec{U}_{PC}] (\vec{U}_g - \vec{U}_{PC}) \quad 2.2.4$$

Onde, o coeficiente de arraste é determinado abaixo:

$$C_{d_{g-PC}} = \left[\frac{24}{Re_{g-PC}} (1 + a Re_{g-PC}^b) + \frac{c}{1 + \frac{d}{Re_{g-PC}}} \right] \left(\frac{\varepsilon_g}{\varepsilon_g - \varepsilon_{PC}} \right)^{-4,65} \quad 2.2.5$$

Os termos a, b, c e d são funções do fator de forma (φ) descritas pelas equações 2.2.5 (a,b,c,d) a seguir:

$$\ln(a) = 2,3288 - 6,4581 \varphi_{PC} + 2,448 \varphi_{PC}^2 \quad 2.2.5 (a)$$

$$b = 0,0964 + 0,5565 \varphi_{PC} \quad 2.2.5 (b)$$

$$\ln(c) = 4,905 - 13,8944 \varphi_{PC} + 18,4222 \varphi_{PC}^2 - 10,2599 \varphi_{PC}^3 \quad 2.2.5 (c)$$

$$\ln(d) = 1,4681 - 12,2584 \varphi_{PC} + 20,7322 \varphi_{PC}^2 + 15,8885 \varphi_{PC}^3 \quad 2.2.5 (d)$$

Diversos estudos têm mostrado a potencialidade do uso da teoria granular para simular leitos fluidizados. A equação de momento da fase sólida necessita, então, ser modificada para contabilizar a transferência de momento devido às colisões partícula-partícula baseada no modelo da teoria cinética (GIDASPOW, 1994). A temperatura granular, Θ , é definida para representar a energia cinética específica da velocidade de flutuação, ou a energia de flutuação translacional resultantes da velocidade de flutuação da partícula equação 2.2.6 (AHUJA & PATWARDHAN, 2008; ZHONG et al., 2007; JIRADILOK et al., 2006; SUN & BATTAGLIA, 2006; TAGHIPOUR, ELLIS & WONG, 2005; SCHMIDT & RENZ, 2000). No escoamento granular, velocidades de flutuações das partículas são assumidas como sendo resultantes das partículas que são carregadas pelo escoamento. A equação da temperatura granular da partícula pode ser expressa em termos de flutuações causadas por cisalhamento, dissipação por escoamento cinético. Além de serem provenientes também de calor de colisão, dissipação devido a colisões inelásticas, turbulência do fluido, colisões com moléculas e dissipação devido a interações com o fluido (GIDASPOW, 1994).

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_s \rho_s \Theta_s) + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \Theta_s \vec{v}_s) \right] = (-\rho_s \bar{I} + \bar{\tau}_s) : \nabla \cdot \vec{v}_s + \nabla \cdot (k_{\Theta_s} \cdot \nabla \cdot \Theta_s) - \gamma_{\Theta_s} \quad 2.2.6$$

Onde Θ_s é a temperatura granular, \bar{I} é o tensor tensão adimensional, p_s é a pressão do sólido dada pela equação 2.2.7, $\bar{\tau}_s$ é o tensor tensão calculado pela equação 2.2.8, λ_s é a viscosidade “bulk” dada pela equação 2.2.9, γ_{Θ_s} é a dissipação de energia por colisão dada pela equação 2.2.10 e a equação 2.2.11 é a viscosidade cisalhante devido ao contato entre as partículas e é constituída pelo somatório das viscosidades de colisão, cinética e de fricção, além de ser a grandeza que fará o acoplamento do tensor tensão na equação

de transporte para a temperatura granular (JIRADILOK et al., 2006; TAGHIPOUR, ELLIS & WONG. 2005; SCHMIDT & RENZ, 2000).

$$\rho_s = \varepsilon_s \rho_s \theta_s + 2\rho_s d_s \varepsilon_s^2 (1 + e_{ss}) \varepsilon_s^2 g_{0,ss} \theta_s \quad 2.2.7$$

$$\bar{\tau}_s = \varepsilon_s \mu_s (\nabla \vec{v}_s + \nabla \vec{v}_s^T) + \varepsilon_s \left(\lambda_s - \frac{2}{3} \mu_s \right) \nabla \cdot \vec{v}_s \bar{\mathbf{I}} \quad 2.2.8$$

$$\lambda_s = \frac{4}{3} \varepsilon_s \rho_s d_s g_{0,ss} (1 + e_{ss}) \left(\frac{\theta_s}{\pi} \right)^{1/2} \quad 2.2.9$$

$$\gamma_{\theta_s} = \frac{12(1 + e_{ss}^2) g_{0,ss}}{d_s \sqrt{\pi}} \rho_s \varepsilon_s^2 \theta_s^{3/2} \quad 2.2.10$$

$$\mu_s = \mu_{s,col} + \mu_{s,fric} + \mu_{s,cin} \quad 2.2.11$$

$$\mu_{s,col} = \frac{4}{5} \alpha_s \rho_s d_s g_{0,ss} (1 + e_{ss}) \left(\frac{\theta_s}{\pi} \right)^{1/2}$$

$$\mu_{s,fric} = \frac{\rho_s \cdot \text{sen}\phi}{2 \cdot \sqrt{I_{2D}}}$$

$$\mu_{s,cin} = \frac{\alpha_s d_s \rho_s \sqrt{\theta_s \cdot \pi}}{6(3 - e_{ss})} \left[1 + \frac{2}{5} (1 + e_{ss}) (3e_{ss} - 1) \alpha_s \cdot g_{0,ss} \right]$$

Onde e_{ss} é o coeficiente de restituição da partícula, d_s é o diâmetro das partículas, ε_s é a fração volumétrica da fase sólida e $g_{0,ss}$ é a função de distribuição radial dada pela equação 2.2.12 (TAGHIPOUR, ELLIS & WONG. 2005; SCHMIDT & RENZ, 2000).

$$g_{0,ss} = \left[1 - \left(\frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_{s,máx}} \right)^{1/3} \right]^{-1} \quad 2.2.12$$

2.3- Propriedades das fases

Esta seção é destinada à demonstração dos métodos de cálculo das propriedades físicas das fases. Estes métodos já foram modelados e testados anteriormente para outros processos como

alto-forno e injeção de finos na região das ventaneiras de alto-forno (CASTRO, 2000; BALTAZAR, 2004).

2.3.1- Propriedades do gás

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

$$\rho_g = \frac{P_g}{RT_g} \sum \omega_{j,g} M_j \quad 2.3.1$$

Onde, j são as espécies gasosas. Viscosidades para componentes puros são calculadas a partir de teorias estatísticas pelas equações a seguir:

$$\mu_g = 2,6693 \times 10^{-6} \frac{1}{\Omega_{\mu,j}} \sqrt{\frac{M_j T_g}{\sigma_j}} \quad 2.3.2$$

$$\Omega_j = \frac{1,16145}{(T^*)^{0,14874}} + \frac{0,52487}{\exp(0,77320T^*)} + \frac{2,16178}{\exp(2,4378T^*)} \quad 2.3.3$$

$$T^* = \frac{k_{Boltzmann} T_g}{\epsilon_j} \quad 2.3.4$$

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

$$k_j = M_j \left(C_{P,j} + \frac{5R}{4M_j} \right) \quad 2.3.5$$

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

$$\lambda_g = \sum_{j \in g} \left[\frac{\gamma_{j,g} \lambda_j}{\sum_{jj \in g} (\gamma_{jj,g} \chi_{j,jj})} \right] (\lambda = \mu, k); \quad \gamma_{j,g} = \frac{(\omega_{j,g} / M_j)}{\sum_{jj \in g} (\omega_{jj,g} / M_j)}; \quad \chi_{j,jj} = \left\{ 1 + (\lambda_j / \lambda_{jj}) (M_{jj} / M_j)^{1/4} \right\}^2 \quad 2.3.6$$

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

$$D_{j,k}^T = 0,0018583 \times 10^{-4} \frac{T^{1/2} \sqrt{\left(\frac{1}{M_j} \right) + \left(\frac{1}{M_k} \right)}}{(P_g / 101325) \sigma_{ave}^2 \Omega_{ave}}; \quad \sigma_{ave} = 0,5(\sigma_j + \sigma_k) \quad 2.3.7$$

$$\Omega_{ave} = \frac{1,06036}{(T^*)^{0,15610}} + \frac{0,19300}{\exp(0,47635T^*)} + \frac{1,03587}{\exp(1,5299T^*)} + \frac{1,76474}{\exp(3,89411T^*)} \quad 2.3.8$$

$$T^* = \frac{k_{Boltzmann} T_g}{\epsilon_{ave}}; \quad \epsilon_{ave} = \sqrt{\epsilon_j \epsilon_k} \quad 2.3.9$$

A temperatura do gás é definida pela equação a seguir:

$$H_g = \sum_{j \in g} \omega_{j,g} \left[\Delta H_{j,g}^{298K} + \int_{298K}^{T_g} C_{p,j}(T) dT \right] \quad 2.3.10$$

$$C_{p,j}(T) = a_j + b_j T + c_j T^{-2} \quad 2.3.11$$

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

$$\frac{1}{Pe_{g-s,d}} = \frac{C_{1,d}}{Re_{g-s} Pr_g} + \frac{C_{2,d}}{1 + \frac{C_{3,d}}{Re_{g-s} Pr_g}} \quad 2.3.12$$

$$Pe_{g-s,d} = \frac{d_s \varphi_s |\vec{U}_g - \vec{U}_s| (\rho_g C_{p,g})}{k_{g,d}^*} \quad 2.3.13$$

2.3.2- Propriedades dos combustíveis

O fator de forma é assumido como sendo unitário, devido às partículas serem consideradas esféricas, a densidade aparente, a

condutividade térmica e o diâmetro são variáveis assumidas como tendo seus 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:

$$C_{P,k} = a_k + b_k T_s + \frac{c_k}{T_s^2} \quad C_{P,s} = \sum_{k \in S} C_{P,k} \omega_{k,s} \quad 2.3.15$$

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

$$H_s = \sum_{k \in S} \omega_k \left[\Delta H_k^{298K} + \int_{298K}^{T_s} C_{P,s} \tau \, dT \right] \quad 2.3.16$$

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 (CASTRO, 2000).

$$k_{s,\text{eff}} = (1 - \varepsilon_s)(k_g + a) + \varepsilon_s \left[\frac{2}{3k_s} + \left(\frac{k_g}{0.274} + b \right)^{-1} \right]^{-1} \quad 2.3.17$$

$$a = \alpha \left[1 + \left(\frac{1 - \varepsilon_s}{\varepsilon_s} \right) \left(\frac{1 - e_s}{2e_s} \right) \right]^{-1} \quad 2.3.18$$

$$b = \alpha \left(\frac{e_s}{2 - e_s} \right) \quad 2.3.19$$

$$\alpha = 0.1952 d_s \left(\frac{T_s}{100} \right)^3 \left(\frac{4.184}{3600} \right) \quad 2.3.20$$

As características numéricas do modelo podem ser observadas no fluxograma da solução numérica na figura 2.3.1 abaixo. O método de volumes finitos pode ser visto na figura 2.3.2, onde as equações de transporte são resolvidas na unidade de volume e transferidas ao

volume seguinte e nas interfaces as grandezas são calculadas pela média dos volumes vizinhos.

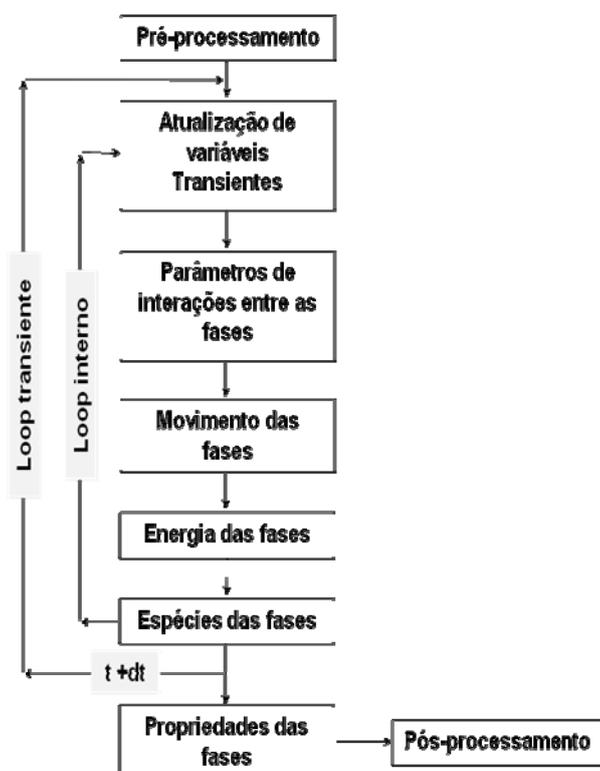


Figura 2.3.1. Fluxograma da solução numérica utilizada na solução das equações apresentadas no modelo.

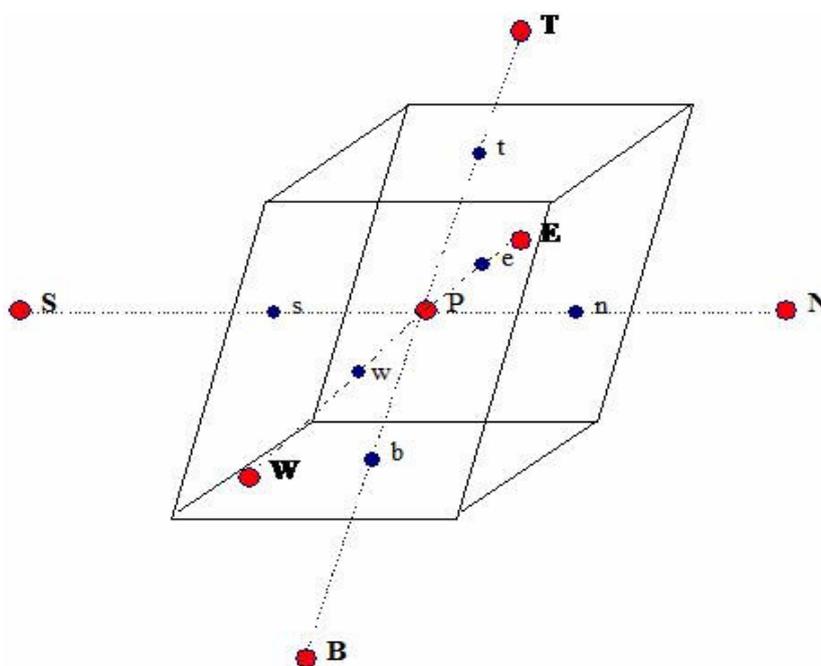


Figura 2.3.2. Solução pelo método dos volumes finitos.

2.4- Considerações sobre o modelo desenvolvido

O modelo desenvolvido tem se mostrado eficiente para simular a fluidização em reator do leito fluidizado conforme poderá ser visto na seção posterior com os resultados que serão apresentados. A teoria cinética do escoamento granular foi de extrema importância no desenvolvimento do modelo, visto que sem o uso da temperatura granular Θ não era possível visualizar a flutuação das partículas. Fato possibilitado com a inclusão de um termo fonte de momento devido às interações partícula-partícula, que é o conceito do escoamento granular usado para o cálculo das tensões e pressão no sólido. As reações consideradas no modelo são todas obtidas de modelos já estudados e estruturados por vários pesquisadores. Porém algumas modificações e considerações precisaram ser feitas, sobretudo na estequiometria e balanços de massa dessas reações. No entanto, novos modelos precisam ser consultados e analisados para a melhoria do que foi aqui desenvolvido e apresentado.

Capítulo 3- Resultados e discussão

Esta seção apresenta os resultados obtidos com o modelo de reator de leito fluidizado. Discutindo cada um deles utilizando sempre um ponto de vista crítico e elucidativo com as questões tecnológicas e científicas referentes ao processo.

3.1- Aplicação a um experimento de fluidização

Os resultados nesta seção foram os primeiros a serem obtidos durante o desenvolvimento do modelo apresentado. Eles dizem respeito à simulação de um experimento em uma coluna vertical de fluidização obtidos da literatura. O objetivo era simular o experimento com os dados da simulação obtidos na literatura e tentar reproduzir os resultados obtidos por Taghipour, Ellis e Wong (TAGHIPOUR, ELLIS & WONG. 2005). A tabela 3.1.1 mostra as condições de entrada e contorno utilizadas nas simulações. Estas condições iniciais e de contorno necessitam ser impostas para representação do processo e para que as equações diferenciais representadas pela equação geral do transporte (equação 2.1.1) possam ser resolvidas. Seguindo a nomenclatura a ser apresentada na figura 3.1.1, as condições de contorno consideradas são: na entrada valor prescrito, nas paredes as condições de contorno assumidas são de fluxo zero e velocidade tangencial e as partículas podem deslizar pelas paredes. Na entrada do reator a pressão de referência é definida, enquanto

que na saída é considerado escoamento completamente desenvolvido e condições de simetria são assumidas para todas as outras variáveis.

Tabela 3.1.1. Parâmetros utilizados para as simulações.

Descrição	Valor	Comentário
Densidade da partícula, ρ_p	2500 kg/m ³	“Glass beads”
Densidade do Gás, ρ_g	1,225kg/m ³	Ar
Diâmetro das partículas, d_p	275 μ m	Distribuição uniforme
Coeficiente de restituição, e_{ss}	0,90	Valor da literatura
Fração inicial no leito fixo, ε_{s0}	0,60	Valor Fixo
Velocidade superficial do gás, U	0,38m/s	$\sim 6 * U_{mf}$
Profundidade do Leito	0,28m	Valor Fixo
Espessura do Leito	0,025m	Valor Fixo
Altura do Leito	1,00m	Valor Fixo
Altura inicial do leito de partículas	0,40m	Valor Fixo
Condições na entrada	Velocidade	Velocidade do gás
Condições da saída	Escoamento	Desenvolvido
“Time steps”	0,001s	Especificado
Critério de convergência	10 ⁻⁶	Especificado

Os resultados que serão apresentados nesta seção se mostram como uma evolução das simulações, pois já apresentam resultados em 3D. A figura 3.1.1 mostra a malha gerada e os tipos de condições iniciais e de contorno usadas para os cálculos no modelo. A figura 3.1.2 mostra imagens em 2D representando a evolução temporal do fenômeno de fluidização para um tempo total de simulação de 3s. Pode ser observada uma evolução contínua da altura do leito até a estabilização que ocorre em um tempo de 2,5s e, então apenas recirculação das partículas é observada. Nos estágios iniciais a formação de uma grande bolha é evidenciada e a expansão do leito ocorre rapidamente. Após 2,5s pode-se observar a recirculação das partículas e a formação de bolhas. Embora a formação de bolhas tenha sido evidenciada elas explodem por se formarem próximas demais do ponto de injeção de gás, então poucos centímetros acima elas explodem e se transformam em um escoamento lento “slug”.

Esta característica é narrada por Hoomans e seus colaboradores (HOOMANS et al., 1996). Nos tempos seguintes é observado um movimento desorganizado das partículas dentro do leito caracterizando, assim, que a fluidização está desenvolvida com uma geração caótica e transiente de bolhas e movimento das partículas como narradas por Taghipour, Ellis e Wong (TAGHIPOUR, ELLIS & WONG. 2005).

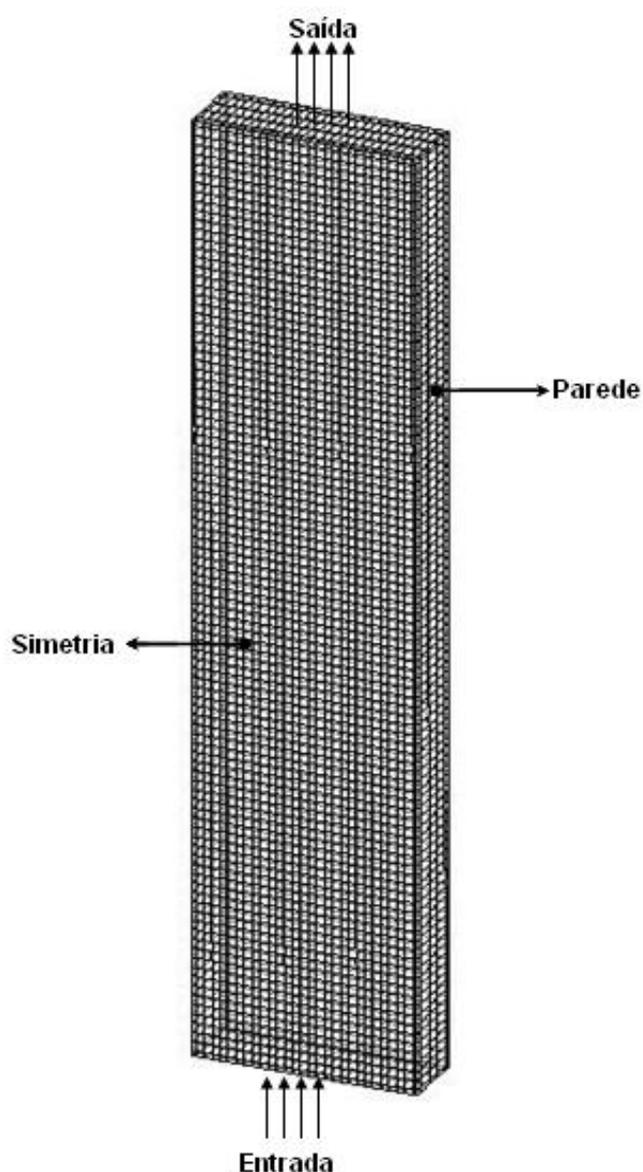


Figura 3.1.1. Imagem em 3D mostrando a malha gerada e os tipos de condições usadas no modelo.

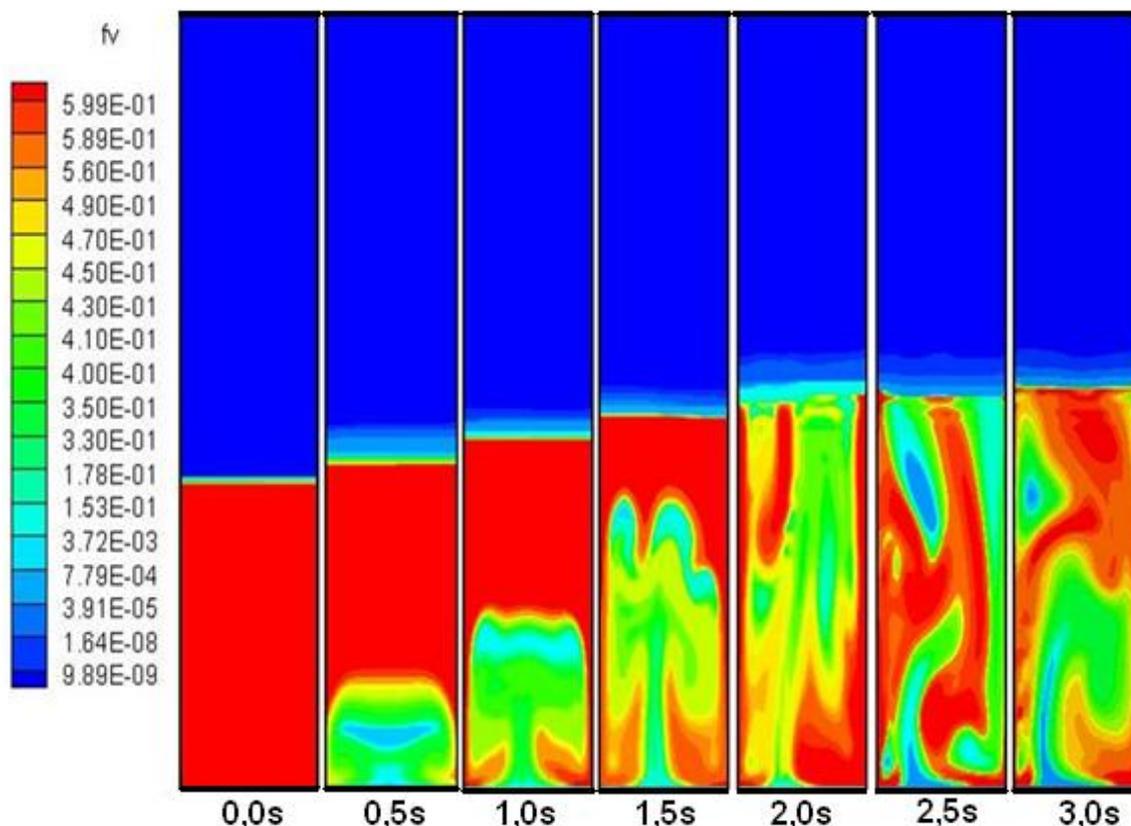


FIGURA 3.1.2. Evolução da altura de um leito fluidizado em um plano vertical com “time step” de 10^{-6} s.

Na figura 3.1.3 (a) é mostrada as linhas de corrente do movimento das partículas na região inferior do leito onde se pode observar que as partículas estão continuamente em ascensão e queda no leito, caracterizando o fenômeno de fluidização. Como apontado em trabalhos anteriores às partículas na região inferior do leito começam a recircular quando a velocidade do gás está em torno da velocidade de mínima fluidização U_{mf} (KAWAGUSHI et al., 1998). Como o movimento das partículas é uma função da velocidade U do gás para velocidades elevadas acima de um valor máximo observa-se que as partículas são carregadas para fora do leito. Gerando o que se chama de transporte pneumático e associa-se a este fato condições de operação do leito instáveis. Na figura 3.1.3 (b) uma imagem em 3D mostrando a fração volumétrica fluidizada das partículas para um tempo de 3s. A expansão do leito é evidenciada e a formação de grandes aglomerados “cluster” de partículas pode ser visto conforme

narrado por Helland, Occeili e Tadríst (HELLAND, OCCELLI & TADRIST, 2000).

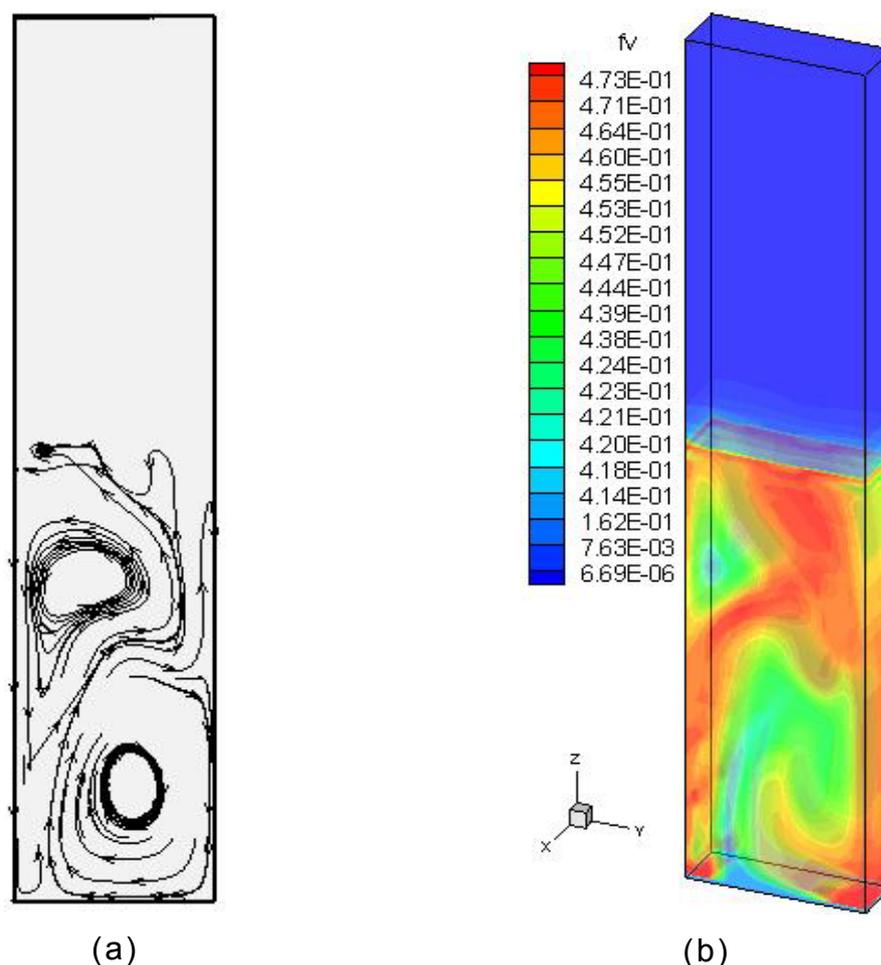


Figura 3.1.3. Linhas de corrente das partículas no leito (a) e imagem 3D mostrando o contorno da fração volumétrica em uma coluna de leito fluidizado, depois de ($t = 3s$).

A influência da velocidade do gás na fluidização foi verificada usando duas velocidades selecionadas $U = 0,12m/s$ e $U = 0,72m/s$. A figura 3.1.4 (a) mostra a fluidização para baixas velocidades. Neste caso o padrão da fluidização foi verificado, no entanto a expansão do leito não é evidente e a formação de bolhas foi insignificante. O movimento do gás foi predominantemente vertical e a flutuação da fração volumétrica dos sólidos foi insignificante. Por outro lado utilizando velocidade acima da velocidade de mínima fluidização pode-se observar que para velocidades elevadas a formação de

bolhas é significativa e a expansão do leito ocorre rapidamente. Na figura 3.1.4 (b) a velocidade do gás é consideravelmente maior que a velocidade de mínima fluidização $U = 0,72\text{m/s}$ o valor da taxa de expansão do leito foi de $(H/H_0 = 0,35)$, que é um valor elevado. Nestas condições as partículas se movem para a região superior do leito e algumas começam a ser carregadas para fora do leito, demonstrando uma condição de operação indesejável. Com estas simulações é possível recomendar a operação do leito na faixa de velocidade entre $0,4\text{m/s}$ e $0,6\text{m/s}$, para garantir condições seguras para uma operação estável e eficiente do leito.

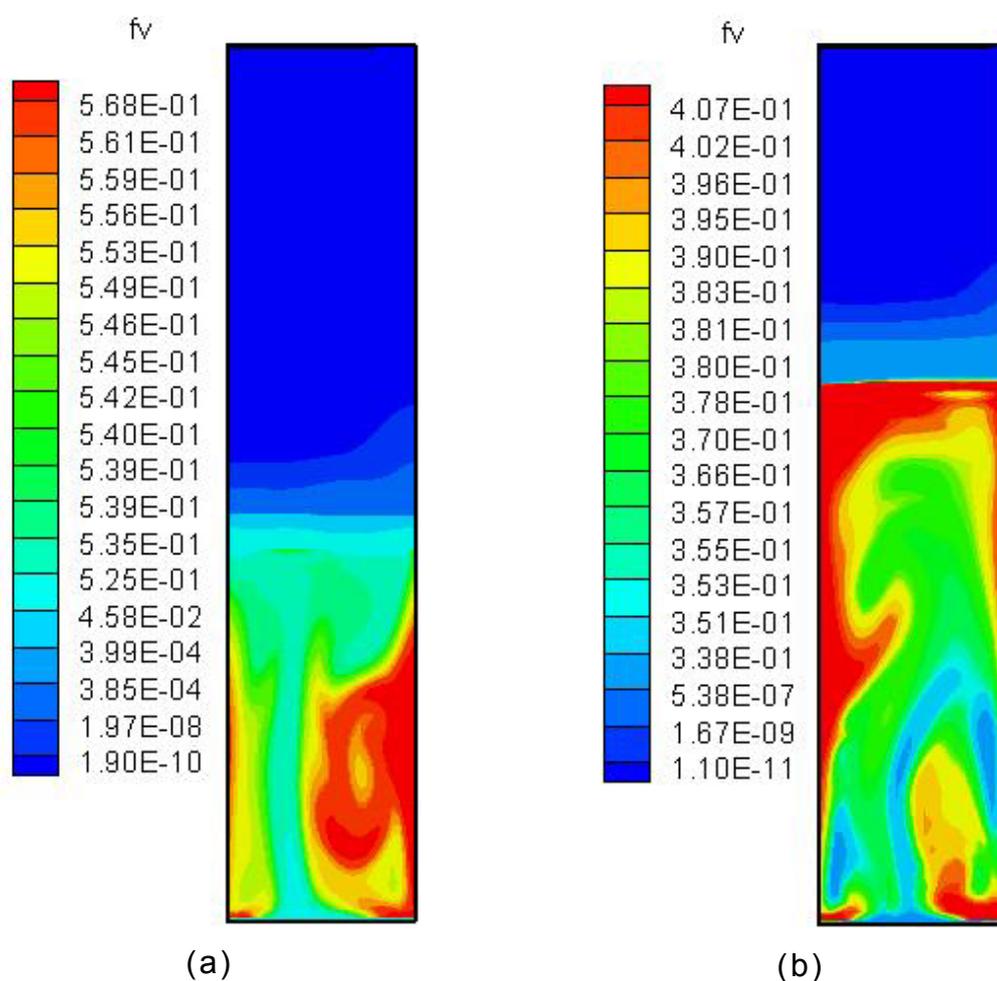


Figura 3.1.4. Contorno da fração volumétrica das partículas usando diferentes velocidades do gás (a) $U = 0,12\text{m/s}$ e (b) $0,72\text{m/s}$.

Parâmetros operacionais importantes para a operação do leito são monitorados e, dois deles serão apresentados por serem os de maior importância na operação de um leito fluidizado. O primeiro é a queda de pressão ΔP , que é importante porque a fração volumétrica através do leito pode ser estimada por esta variável (KUNNI & LEVENSPIEL, 1991). A queda de pressão calculada neste modelo é comparada à queda de pressão calculada por outros modelos na figura 3.1.5. No início da fluidização o modelo prevê altos valores de ΔP , que começa a estabilizar em torno de um valor médio relacionados aos apresentados pelos outros modelos. A diferença observada entre os modelos inicialmente pode ser atribuída à metodologia de solução para o cálculo da fração volumétrica de sólidos. Neste modelo ela é calculada diretamente pela equação da continuidade, enquanto que nos outros modelos apresentados é calculada por correlações empíricas baseadas na queda de pressão. A instabilidade da queda de pressão reflete a formação de bolhas e aglomerados “clusters”, a qual após a estabilização indica condições apropriadas para operação. O critério de convergência utilizado pelos modelos citados é de 10^{-3} , enquanto que neste modelo é de 10^{-6} contribuindo, assim, para maior estabilidade dos resultados.

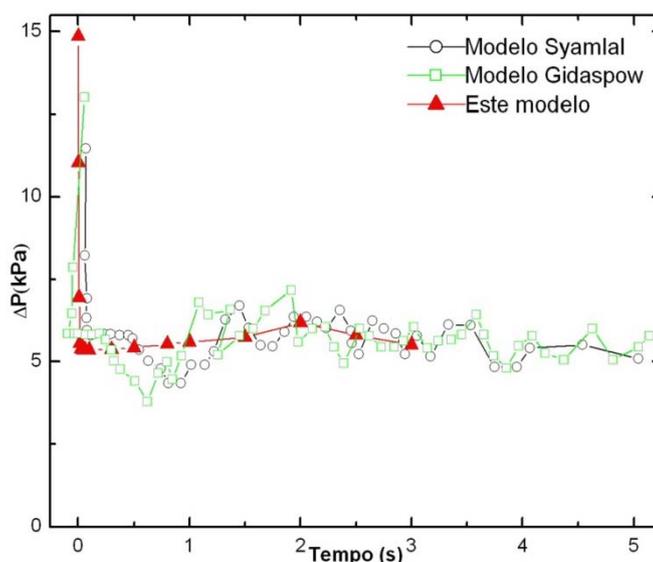


Figura 3.1.5. Queda de pressão obtida por este modelo e modelos da literatura (TAGHIPOUR, ELLIS & WONG, 2005).

A taxa de expansão do leito é outro parâmetro importante no processo de fluidização, porque este parâmetro representa o deslocamento da coluna de sólidos no leito. Este parâmetro pode ser visto na figura 3.1.6, onde as taxas obtidas para este trabalho são comparadas com resultados experimentais e com os modelos citados.

Os resultados obtidos por este modelo foi o que mais se afastou dos resultados experimentais, porém não se desviou muito dos resultados obtidos por modelos da literatura.

Pode-se ver que os resultados obtidos entre os modelos apresentam-se com boa concordância, apesar do desvio em relação aos dados experimentais. Cabe ressaltar que os modelos usados para comparação são próprios para o fenômeno de fluidização, enquanto o utilizado para este desenvolvimento é um modelo adaptado.

O desvio entre os modelos e os dados experimentais, pode ser explicado pelas funções de coeficiente de arraste usadas, as quais não cobrem todas as regiões de fluidização observadas no interior do reator.

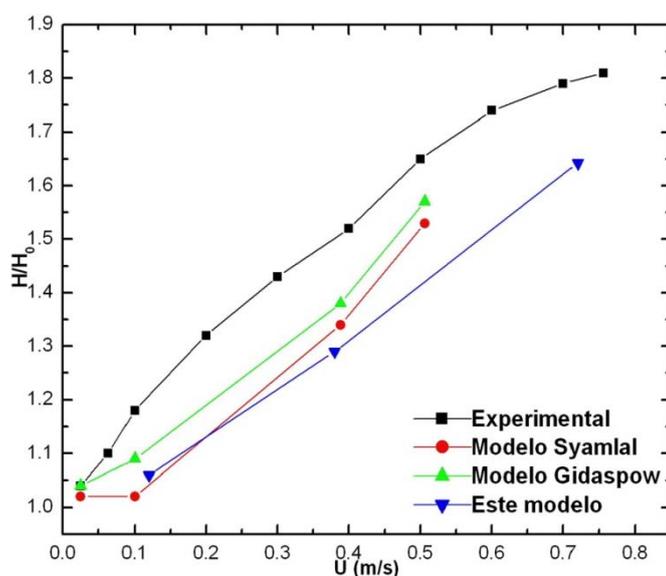


Figura 3.1.6. Comparação da taxa de expansão do leito fluidizado H/H_0 resultados apresentados por Taghipour e, este modelo com velocidades do gás de ($U = 0,12; 0,38; 0,72\text{m/s}$).

3.2- Aplicação a um combustor de leito fluidizado

Os resultados apresentados nesta seção dizem respeito à utilização do modelo desenvolvido para simular um combustor de leito fluidizado em escala piloto. Este tipo de reator de leito fluidizado é utilizado para a combustão de carvão e biomassas. Os resultados a serem apresentados dizem respeito ao comportamento fluidodinâmico neste tipo de reator e os parâmetros utilizados podem ser vistos na tabela 3.2.1.

Tabela 3.2.1. Parâmetros para simulação do reator de leito fluidizado.

Descrição	Valor	Comentário
Densidade do leito material, ρ_p	2600 kg/m ³	Areia
Densidade do Gás, ρ_g	1,225kg/m ³	Ar
Diâmetro das partículas, d_p	2500 μ m	Distribuição uniforme
Coeficiente de restituição, e_{ss}	0,90	Valor da literatura
Fração inicial no leito fixo, ϵ_{s0}	0,60	Valor Fixo
Velocidade superficial do gás, U	0,7m/s	$\sim 6,5 * U_{mf}$
Pressão de entrada	1atm	Valor Fixo
Altura do leito de partículas	0,70m	Valor Fixo
Condições na entrada	Velocidade	Velocidade do gás
Condições na saída	Escoamento	Desenvolvido
“Time steps”	0,001s	Especificado
Critério de convergência	10 ⁻⁶	Especificado

A figura 3.2.1 mostra um desenho esquemático do reator de leito fluidizado e suas respectivas dimensões. Este reator é utilizado pelo Cientec R.S. para ensaios de combustão em escala semi-industrial, para que combustíveis possam ser testados e avaliados quanto sua eficiência na geração de calor para uso energético.

A figura 3.2.2 mostra a malha gerada para discretização das equações resolvidas pelo método de volumes finitos. As condições de contorno laterais do reator são condições de parede, porém as partículas têm uma velocidade mínima de deslizamento para que

estas possam escoar no leito. As condições de entrada e saída são, respectivamente, velocidade do gás e de escoamento completamente desenvolvido.

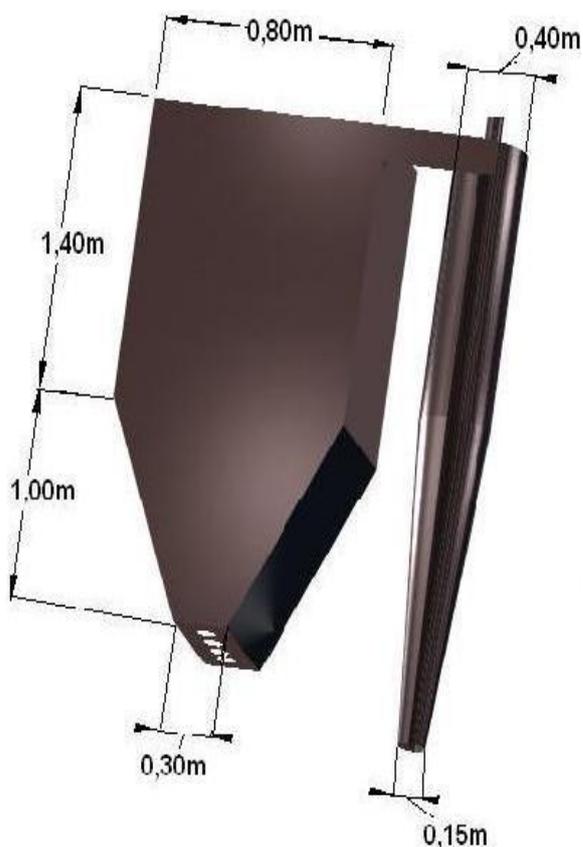


Figura 3.2.1. Geometria e dimensões do reator de leito fluidizado.

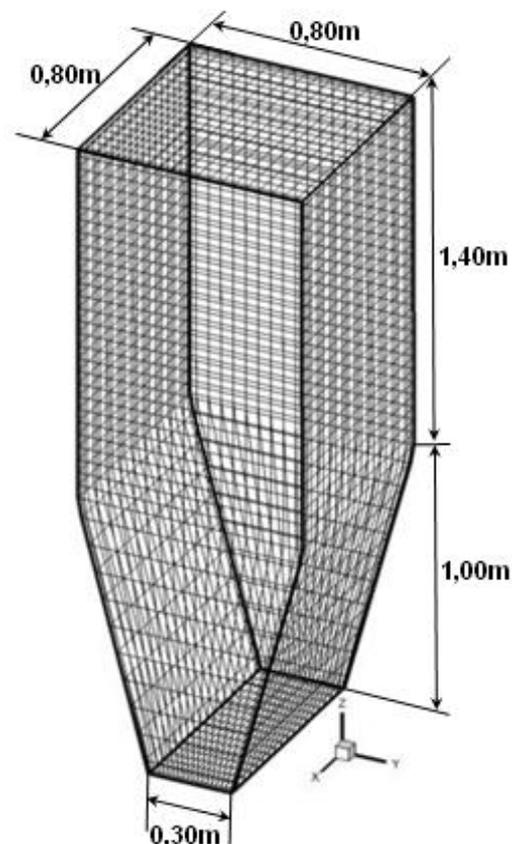


Figura 3.2.2. Malha gerada para discretização das equações.

A figura 3.2.3 mostra uma imagem 3D da fração volumétrica das partículas no reator. Observa-se um acúmulo de partículas próximo as paredes do reator, este fato é explicado pelo fato dos distribuidores estarem localizados na região central. Portanto, as partículas são jogadas da região central para a periferia do reator onde a velocidade do gás é menor, então se aglomeram e começam a cair dando movimento ao leito. Na figura 3.2.3 pode ser observado também uma característica do funcionamento do leito fluidizado que é a separação em duas regiões distintas após o completo

desenvolvimento do fenômeno. A primeira se localiza na região inferior do reator e é chamada de seção fluidizada, onde o fenômeno é caracterizado pela formação de bolhas que arrastam as partículas no interior do leito. A segunda que é uma região imediatamente acima da primeira é chamada de seção de desprendimento “disengaging section”, que é formada pelas partículas que se desprendem da região fluidizada e ficam flutuando acima do leito.

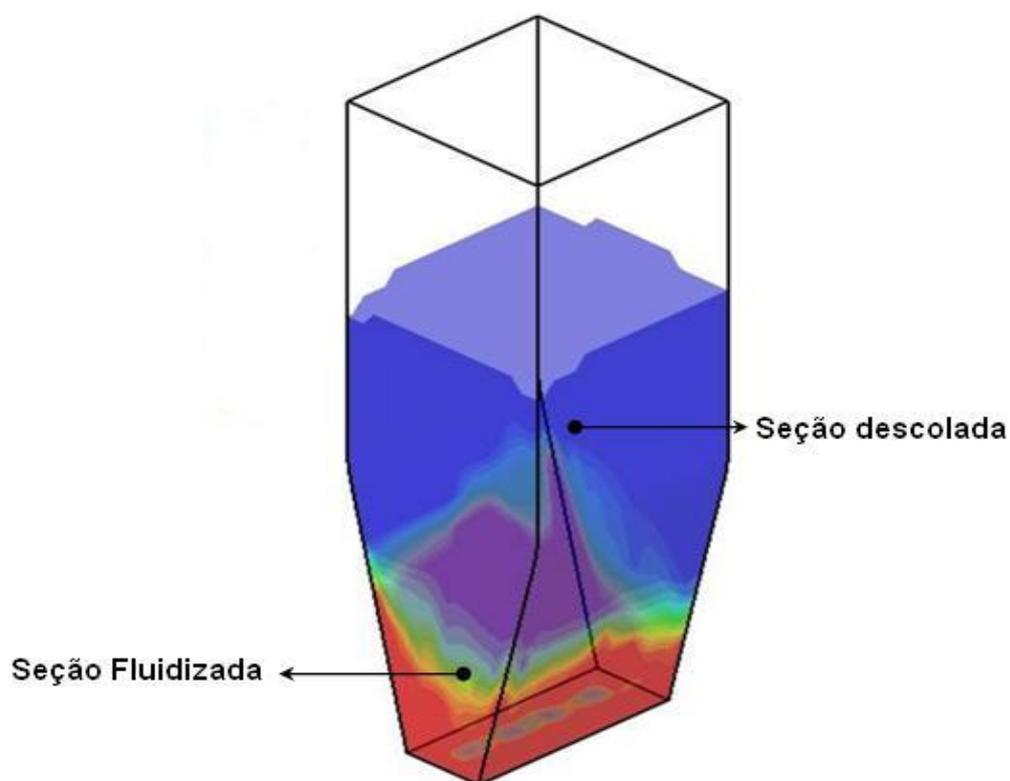


Figura 3.2.3. Imagem 3D da fração volumétrica da fase sólida. (t=4,0s)

A figura 3.2.4 mostra a evolução do processo de fluidização com o tempo. Na evolução da fluidização pode ser observada a formação de bolhas. No início uma grande bolha é formada e o leito inicia sua expansão. Após isto é observada uma queda de pressão e um movimento caótico das partículas devido à formação de bolhas e aglomeração das partículas “clusters”. A escala não aparece para otimizar o espaço, mas será apresentada nas demais figuras.

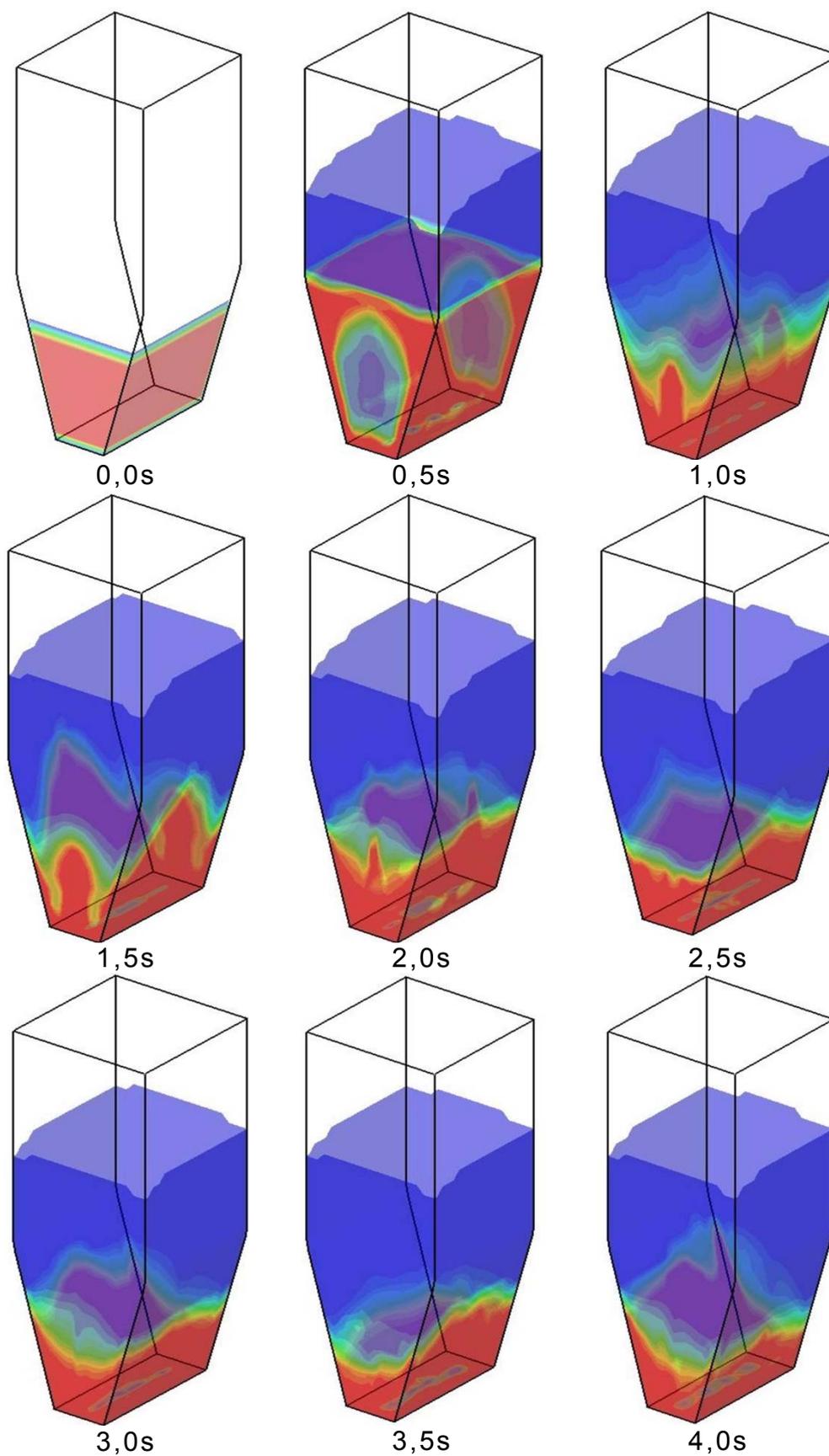


Figura 3.2.4. Evolução transiente da fluidização. ($t=0 - 4,0s$)

As partículas na região inferior do reator começam a recircular quando a velocidade do gás é maior que a velocidade de mínima fluidização U_{mf} . Então, após serem arrastadas pelo gás as partículas atingem uma altura onde o arraste se torna menor que a força gravitacional, então elas começam a cair com velocidade terminal U_t . Embora as bolhas tenham sua formação evidenciada elas explodem por serem formadas muito próximas aos pontos de entrada de gás. Então, a poucos centímetros de elevação as bolhas se transformam em um escoamento lento das partículas “slug”. A recirculação das partículas mostra que a fluidização foi alcançada e o tempo de residência das partículas no reator aumenta fato que é interessante para a eficiência do reator.

A Figura 3.2.5 mostra o contorno obtido para a fração volumétrica de sólidos no interior do reator para um tempo de 5 segundos.

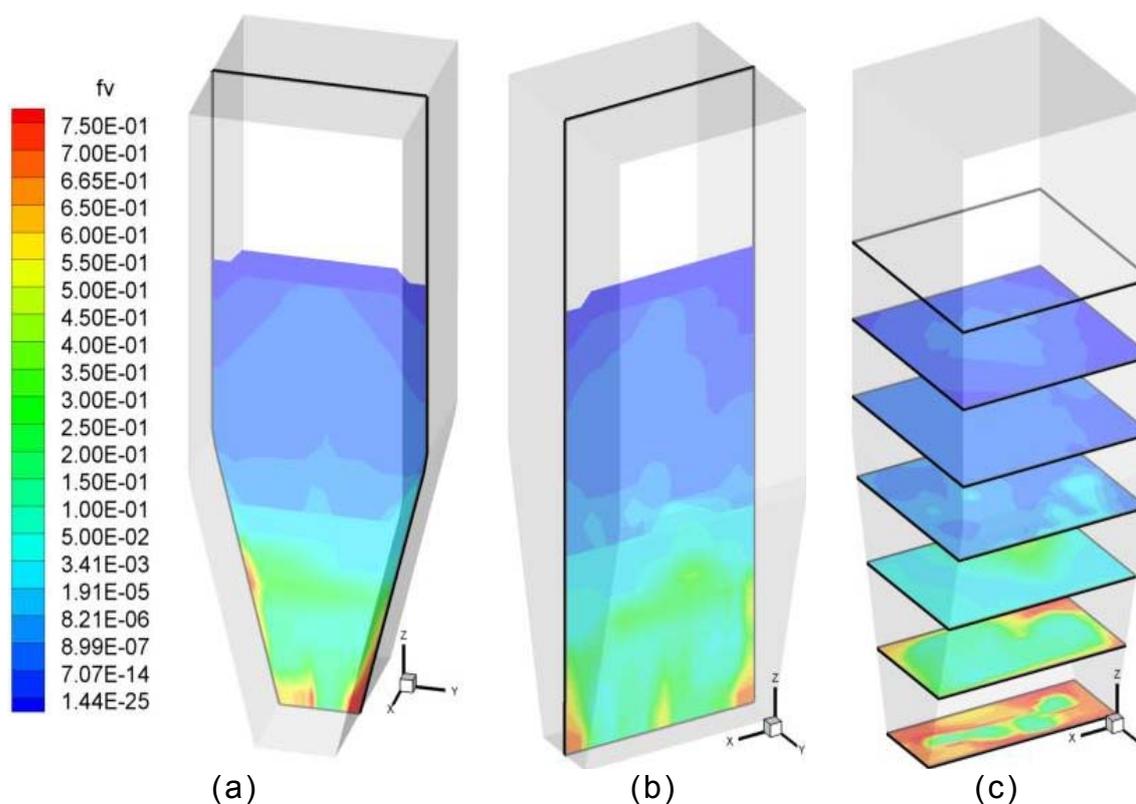


Figura 3.2.5. Fração volumétrica de sólidos no interior do reator; (a) plano X; (b) plano Y; (c) plano Z. ($t=5s$)

A figura 3.2.5 (a) representa uma fatia “slice” em um ponto sobre um dos distribuidores e foi retirada em um plano X. A figura 3.2.5 (b) é a representação do contorno da fração volumétrica sobre os pontos de distribuição do gás, retirada em uma fatia no plano Y. A figura 3.2.5 (c) mostra a fração volumétrica em varias fatias no plano Z. Nas imagens mostradas na figura 3.2.5 (a, b, c) fica evidente que as partículas estão sendo arrastadas pelo gás e atingem uma altura muito maior que a altura inicial de partículas no leito.

O movimento relativo das partículas após 5 segundos pode ser visto na figura 3.2.6, onde as linhas de corrente do escoamento “stream traces” são mostradas caracterizando uma recirculação, ou seja, um movimento contínuo das mesmas no reator, que são arrastadas pela corrente de gás.

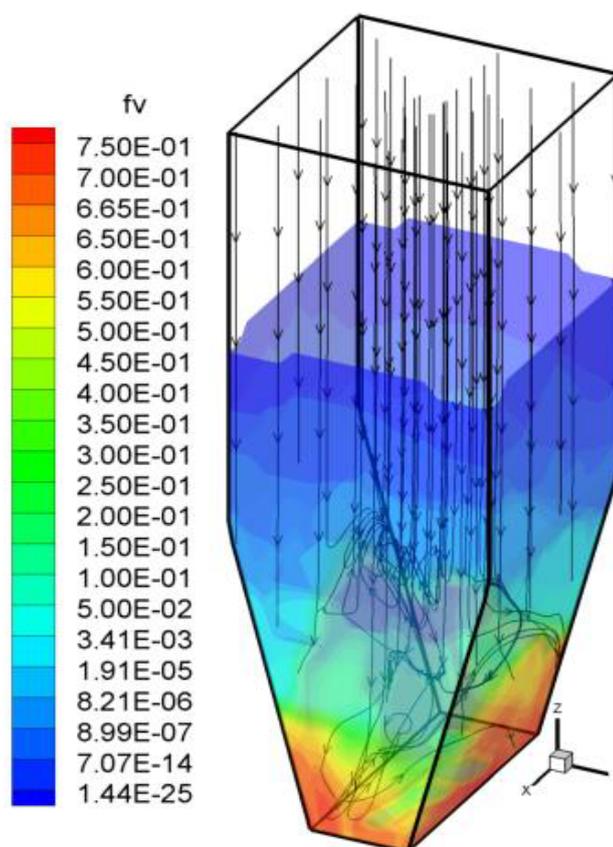


Figura 3.2.6. Linhas de corrente “stream traces” do movimento das partículas no reator. (t=5s)

3.3- Análise de sensibilidade do modelo

Esta seção tem por objetivo analisar o comportamento do modelo desenvolvido mediante a variação de parâmetros operacionais, ou seja, como os resultados são afetados quando as condições iniciais são diferentes das que foram utilizadas durante o desenvolvimento do modelo. Esse teste serve para saber se o modelo desenvolvido é sensível à variação de parâmetros, ou propriedades do material utilizado.

A figura 3.3.1 mostra o comportamento do modelo ao se variar à velocidade de entrada do gás, quatro velocidades diferentes foram utilizadas U_{mf} , $2U_{mf}$, $5U_{mf}$, $8U_{mf}$. Pode se observar pelo gráfico que para velocidade duas vezes maior que a de mínima fluidização os valores de ΔP atingido é maior que o de mínima fluidização, no entanto após a estabilização do fenômeno ele tende a valores próximos ao de mínima fluidização. Para velocidade cinco vezes maior ΔP inicialmente atinge valores elevados mas que tendem a se aproximar do valor de mínima fluidização após a estabilidade do processo. No entanto, quando se utilizou uma velocidade oito vezes maior que a de mínima fluidização, o ΔP apresenta valores que oscilam muito próximo aos apresentados para as menores velocidades. Isto é devido ao fato deste valor de velocidade ocasionar ao processo um transporte pneumático das partículas, ou seja, as partículas são arrastadas pela corrente de gás para fora do leito. Com menor quantidade de partículas a queda de pressão fica menor, pois há menor resistência a passagem do gás pelo leito. Este resultado demonstra que para o caso em questão, o leito deve funcionar com velocidades entre (U_{mf} e $5U_{mf}$), pois para velocidades maiores que $5U_{mf}$ poderá ocorrer o arraste das partículas para fora do leito. A figura 3.3.2 mostra a variação na taxa de expansão do leito H/H_0 onde pode se ver que o caso com velocidade de $8U_{mf}$ é o que apresenta a maior taxa de expansão confirmando assim que as partículas são arrastadas para fora do leito. Pode se perceber

também que para tempo maior que um segundo a taxa de expansão sofre uma queda, devido à redução da quantidade de partículas no interior do leito. Os parâmetros apresentados confirmam que as velocidades ideais para operação do leito estão entre U_{mf} e $5U_{mf}$.

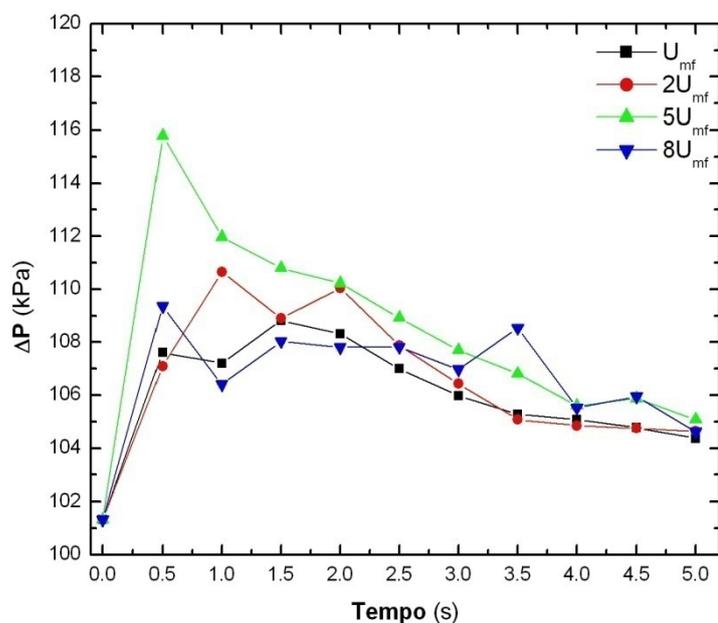


Figura 3.3.1. Queda de pressão ΔP com diferentes velocidades de entrada do gás.

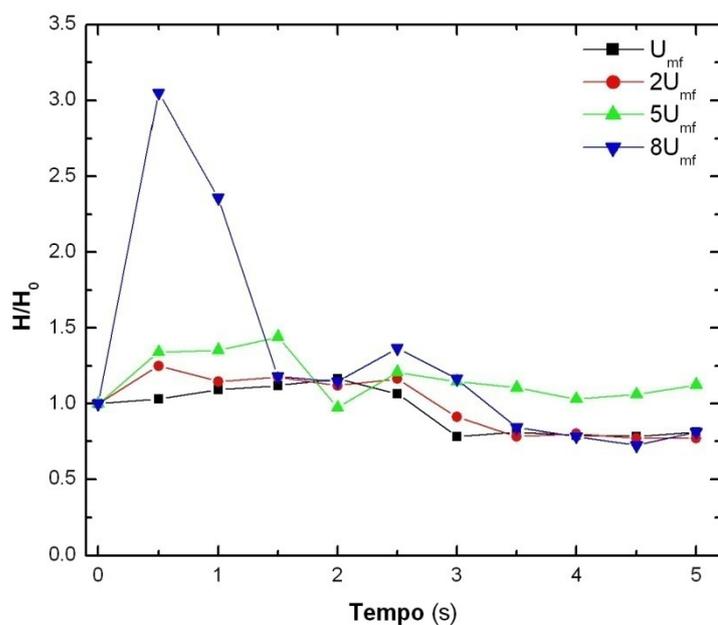


Figura 3.3.2. Taxa de expansão H/H_0 do leito para diferentes velocidades de entrada do gás.

A figura 3.3.3 mostra a variação de outro parâmetro do processo que é a altura inicial do leito H_0 . Três valores foram utilizados para testar o comportamento do modelo. Os resultados obtidos demonstram que o modelo se comportou como o esperado. Portanto, com um maior número de partículas no leito a queda de pressão (ΔP) é conseqüentemente elevada, pois o escoamento do gás é dificultado pelo aumento no peso do leito. O arraste, então, deve extrapolar o valor do peso para que as partículas iniciem o movimento fazendo com que o valor do (ΔP) diminua.

Os valores obtidos para (ΔP) maiores que o padrão que é de H_0 igual a 0,3 m mesmo após o fenômeno de fluidização ser atingido não se aproximam do valor padrão da operação do leito que é em torno de 105 kPa. Isto é explicado novamente pelo peso das partículas no leito o que faz a operação do leito nas mesmas condições iniciais da operação padrão ficarem acima de 110 kPa. A escolha da altura de operação do leito deve ser tomada através de critérios técnicos e com a variação de outros parâmetros operacionais para que não ocorram perdas de rendimento e eficiência do processo.

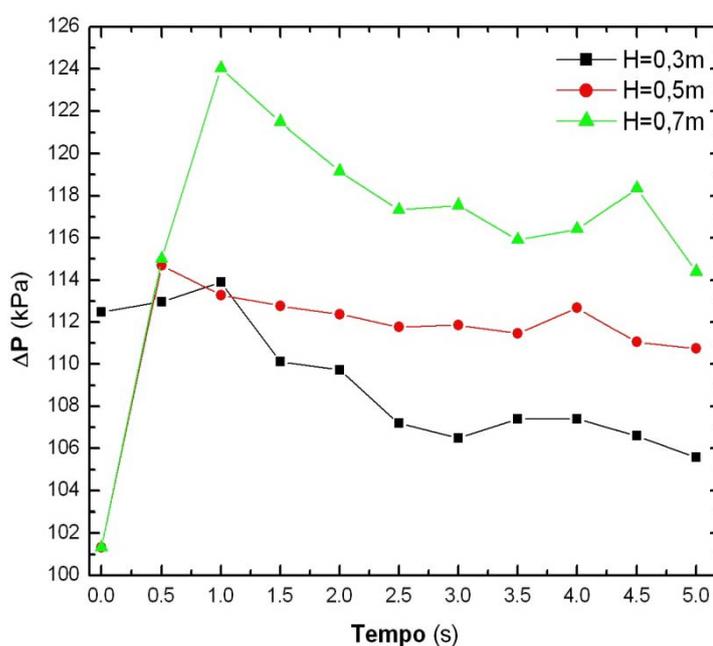


Figura 3.3.3. Queda de pressão no leito para diferentes alturas iniciais de partículas.

A Figura 3.3.4 mostra a variação na queda de pressão no leito variando o coeficiente de restituição (e) da partícula. Não houve diferença no resultado para os valores do coeficiente de restituição utilizados, isto pode ser explicado por duas vias a primeira diz respeito à equação de arraste usada no modelo que não considera, diretamente, o valor de (e). O segundo pode ser explicado pelo fato da velocidade utilizada para as simulações terem sido a mesma e Goldschmidt enuncia que o efeito do coeficiente de restituição fica mais pronunciado quando a velocidade de entrada do gás U é maior que a de mínima fluidização U_{mf} . (GOLDSCHMIDT et al. 2001) Esta grandeza foi analisada por sugerir que os valores de coeficiente de restituição perto de 0,99 conservam toda energia durante a colisão partícula-partícula. O coeficiente de restituição é provável que seja menor para leitos densamente empacotados, pois as colisões entre as partículas tornam-se menos ideal, dissipando uma maior fração da energia. (TAGHIPOUR, ELLIS & WONG. 2005) O que não é o caso do leito fluidizado que se caracteriza por apresentar considerável porosidade para a passagem do fluxo de gás.

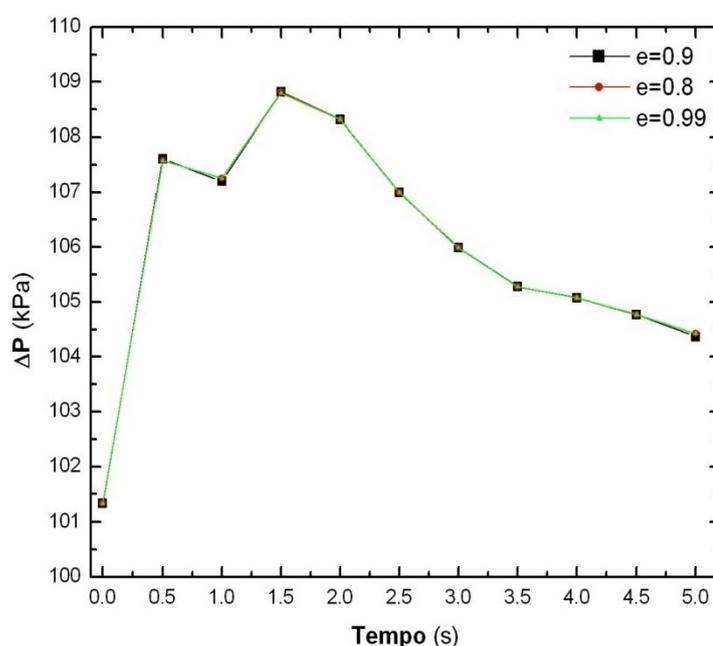


Figura 3.3.4. Queda de pressão no leito para diferentes valores de coeficiente de restituição da partícula (e).

Na figura 3.3.5 pode ser visto o resultado para (ΔP), quando o diâmetro das partículas é variado. Três diâmetros foram utilizados $d=2,5$, $3,5$ e $4,5$ mm. O resultado demonstra que para partículas de $3,5$ mm um maior valor de (ΔP) foi atingido, inicialmente, demonstrando que estas partículas foram mais dificilmente arrastadas pelo fluxo de gás. Porém, foram essas mesmas partículas que após a estabilização do fenômeno atingiram o menor valor de queda de pressão. Enquanto, as partículas com $2,5$ mm de diâmetro que são o tamanho normalmente utilizado no processo apresentaram uma variação menor que os outros dois como era esperado. Devido ao fato dessas serem menores e por conseqüência mais leves oferecendo menor resistência ao arraste. As partículas com $4,5$ mm alcançam valores iniciais menores que as de $3,5$ mm, no entanto após a estabilização do fenômeno ($t=5s$) elas apresentam maior resistência ao arraste visto que o último valor do gráfico demonstra tendência ao aumento de (ΔP) para tempos maiores que $5s$. No entanto pode-se dizer que partículas cujo diâmetro esteja entre $2,5$ e $4,5$ mm podem ser utilizadas no processo.

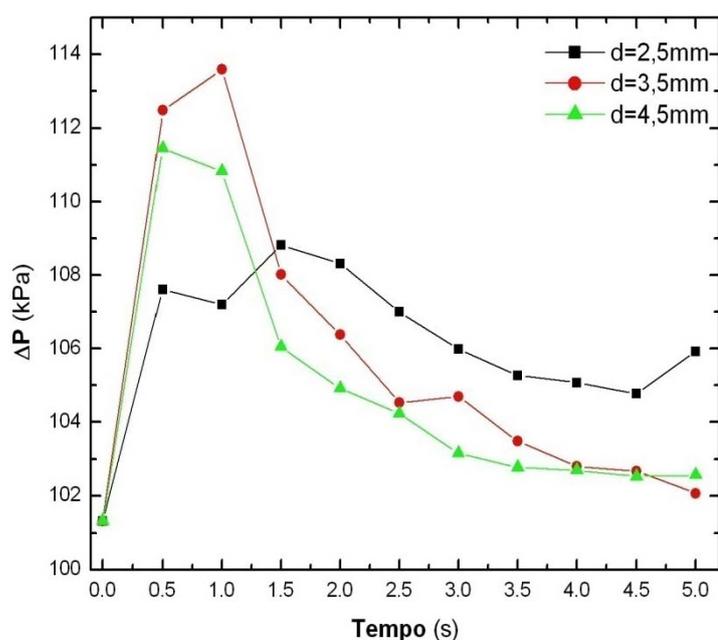


Figura 3.3.5. Queda de pressão no leito para diferentes valores densidade da partícula (d).

A figura 3.3.6 mostra (ΔP) para a simulação com três malhas diferentes, resultando em diferentes quantidades de volumes de controle, as malhas utilizadas e quantidades de volumes foram: 1- (20x20x40), 12312 volumes de controle, 2- (20x18x35), 9504 volumes de controle e 3- (20x18x30), 8064 volumes de controle. Pode se perceber pelo gráfico apresentado que para malhas mais grosseiras os resultados obtidos para a queda de pressão foram mais altos que para uma malha mais refinada. Este fato indica que as quantidades de volumes de controle usadas para o cálculo interferem diretamente no resultado como era esperado. Portanto, a malha um ou malhas mais refinadas que esta deve ser utilizada durante as simulações para obtenção de resultados mais precisos e confiáveis. No entanto cabe ressaltar que para a escolha de uma malha deve se levar em consideração o tempo de simulação e o esforço computacional necessário para o cálculo. Pois, malhas muito refinadas demandam elevado esforço computacional elevando, assim, grandemente o tempo de simulação.

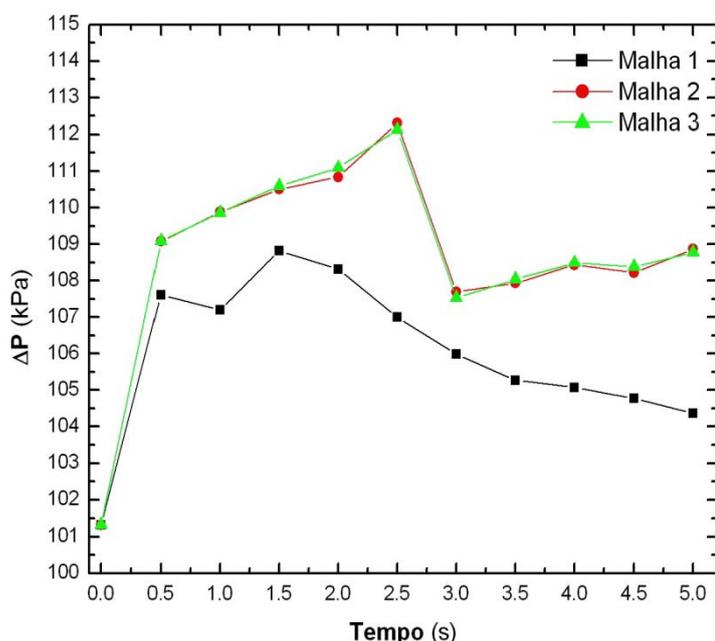


Figura 3.3.6. Queda de pressão no reator para simulações com diferentes quantidades de volumes de controle (malha).

3.4- Combustão de carvão e biomassa em RLF em escala piloto

Os resultados apresentados nesta seção são referentes a simulações utilizando dados do processo de combustão em escala semi-industrial. Foram utilizados nas simulações dois tipos de carvões, um importado e outro nacional além de uma biomassa. As análises composicionais dos combustíveis citados podem ser vistas na tabela 3.4.1.

Tabela 3.4.1. Análise imediata e elementar dos carvões e biomassa utilizados nas simulações.

Matérias-primas utilizadas para as simulações		Mina Recreio R.S. (KALKEUTH et al., 2005)	Black Thunder coal (ROBINSON et al., 2002)	Palha de Arroz cru (BAKKER et al., 2002)
Análise imediata (massa seca)	Cinzas	39,56	7,22	18,27
	Matéria volátil	26,6	43,20	-
	Carbono fixo	33,8	46,0	32,4
Análise elementar (%massa seca livre de cinzas)	C	45,5	70,37	39,6
	H	3,07	7,91	4,64
	N	0,82	1,01	0,72
	O	9,9	12,83	36,36
	S	1,15	0,56	0,11
Cinza (% massa na cinza como óxido)	SiO ₂	24,89	3,126	-
	Al ₂ O ₃	10,98	1,34	1,28
	Fe ₂ O ₃	1,35	0,4	27,2
	MgO	0,13	0,34	-
	CaO	0,85	1,65	-
	FeS ₂	0,76	-	-
Poder Calorífico (kcal/kg)		4350	5141	3604

As condições iniciais e de contorno utilizadas podem ser vistas na tabela 3.4.2 e referem-se a parâmetros de processo da planta piloto do CIENTEC-RS. A velocidade do gás é relativamente elevada, comparada à velocidade de mínima fluidização, para que se possa manter a vazão necessária para a queima dos combustíveis utilizados. A vazão é constante em torno de 400 kg/h de ar para a queima de 40 kg/h de carvão que é alimentado continuamente após o início da fluidização e aquecimento do reator a 450⁰C, que leva cerca de quatro horas para ser atingido. O aquecimento é feito pela queima de etanol produzindo um ar aquecido a uma temperatura de 850⁰C. Todo esse processo é contemplado pelo modelo, embora os resultados apresentados não considerem o aquecimento. As simulações foram conduzidas considerando o reator já aquecido, devido ao fato de se despender grande tempo de simulação para ajuste do processo e a falta de dados para validá-los.

Tabela 3.4.2. Parâmetros para simulação do reator de leito fluidizado.

Descrição	Valor	Comentário	
Densidade da areia, ρ_p	2.600kg/m ³	Areia	
Densidade do carvão, ρ_p	1.250kg/m ³	Carvão	
Densidade da biomassa, ρ_p	1.300kg/m ³	Biomassa	
Densidade do Gás, ρ_g	1.225kg/m ³	Ar	
Diâmetro das partículas, d_p	2.500 μ m	Areia	Distribuição uniforme
Diâmetro das partículas, d_p	4.200 μ m	Carvões	
Diâmetro das partículas, d_p	3.900 μ m	Biomassa	
Coeficiente de restituição, e_{ss}	0,90	Valor da literatura	
Fração inicial no leito, ε_{s0}	0,60	Valor Fixo	
Velocidade do gás, U	1,23m/s	$\sim 15^* U_{mf}$	
Pressão de entrada	1atm	Valor Fixo	
Altura do leito de partículas	0,70m	Valor Fixo	
Condições na entrada	Velocidade	Velocidade do gás	
Condições na saída	Escoamento	Desenvolvido	
“Time steps”	0,001s	Especificado	
Critério de convergência	10 ⁻⁶	Especificado	

3.4.1- Simulação da combustão dos carvões

Nesta seção os resultados são referentes aos carvões e serão apresentados na seguinte ordem; combustão do carvão com maior teor de voláteis, menor teor e combustão conjunta com 50% de cada.

A figura 3.4.1 mostra a evolução temporal do CO liberado pela queima do carvão no interior do reator após 5, 15, 30 mil iterações para o carvão com maior teor de voláteis. Observa-se uma maior concentração desse gás na região de alimentação devido à devolatilização do carvão e início da combustão parcial do carbono.

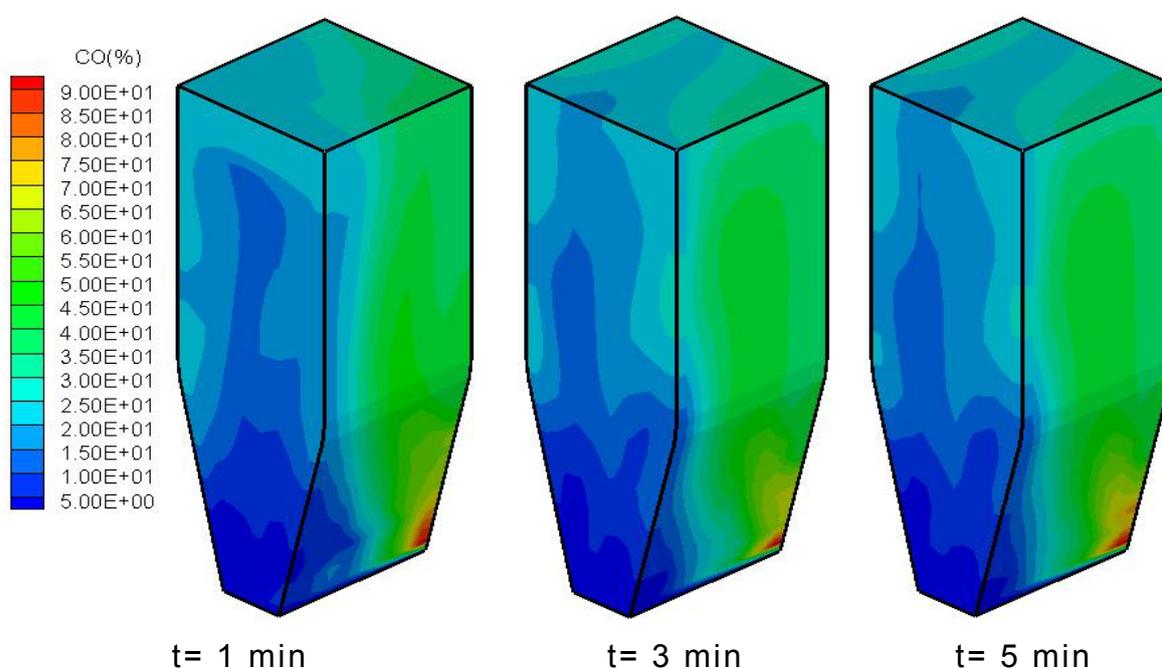


Figura 3.4.1. Comportamento do CO resultante da combustão no interior do reator.

A figura 3.4.2 mostra o comportamento do CO_2 para 5, 15 e 30 mil iterações. A concentração no fundo do reator começa evoluir lentamente pela geração resultante da queima de carbono e da matéria volátil, porém parte do gás carbônico gerado é consumido pela reação de “solution loss” aumentando a concentração de CO e diminuindo a de CO_2 . Outra reação que consome CO_2 produzindo CO é a reação com H_2 .

A figura 3.4.3 mostra a variação da quantidade do vapor d'água liberado no meio para as mesmas 5, 15 e 30 mil iterações. A maior parte da umidade do carvão é consumida no caminho da alimentação de carvão antes do fundo do reator, enquanto em outras regiões esse consumo é mais lento. A concentração, porém vai diminuindo ao longo do tempo pela elevação da temperatura do meio reacional.

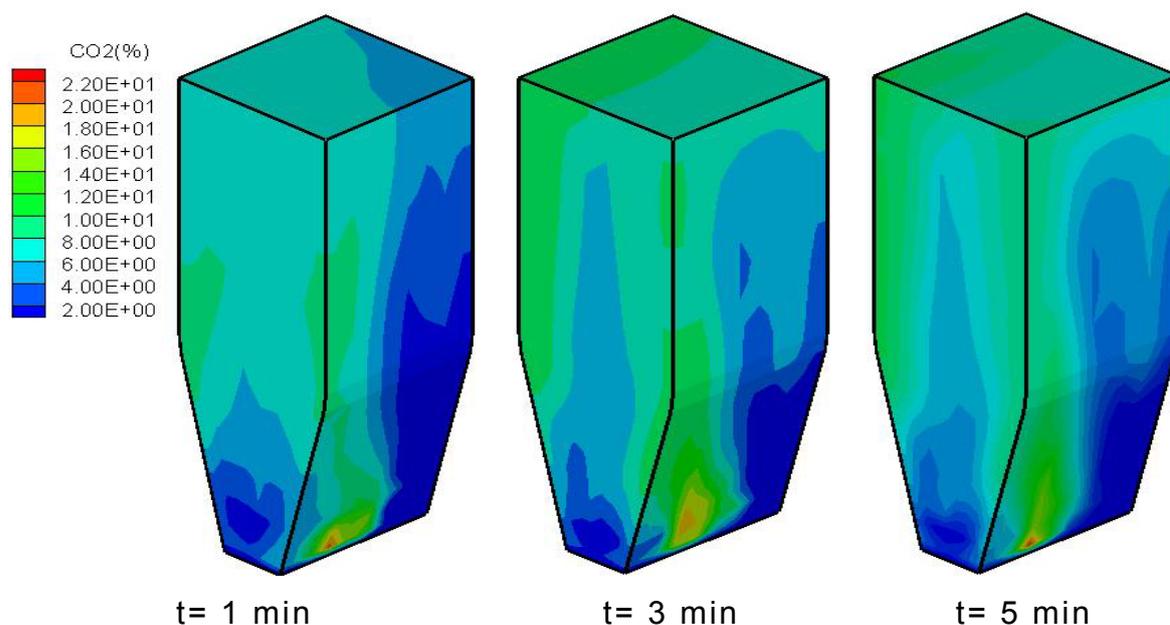


Figura 3.4.2. Comportamento do CO₂ resultante da combustão.

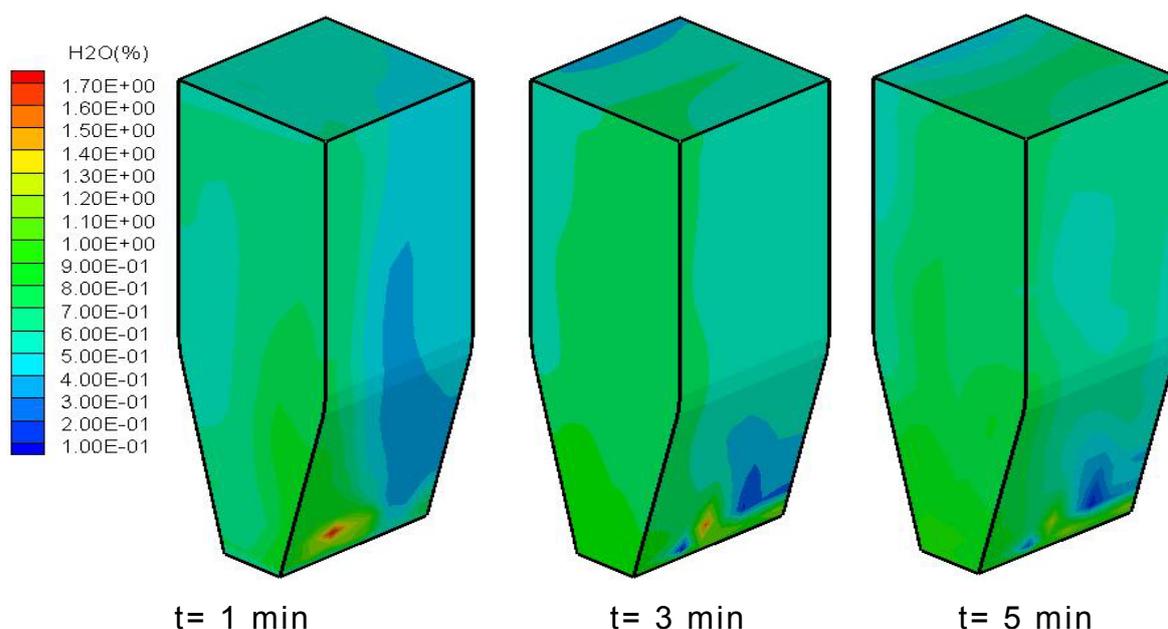


Figura 3.4.3. Comportamento do vapor d'água no interior do reator.

A figura 3.4.4 mostra o comportamento do SO liberado, a formação de SO segue modelos cinéticos para queima do enxofre orgânico e inorgânico. Porém pode-se afirmar que o resultado obtido é em sua maior parte proveniente da queima de enxofre orgânico. Visto que, a cinética para enxofre inorgânico considera a pirita que se decompõe a temperaturas um pouco mais elevadas que o enxofre orgânico.

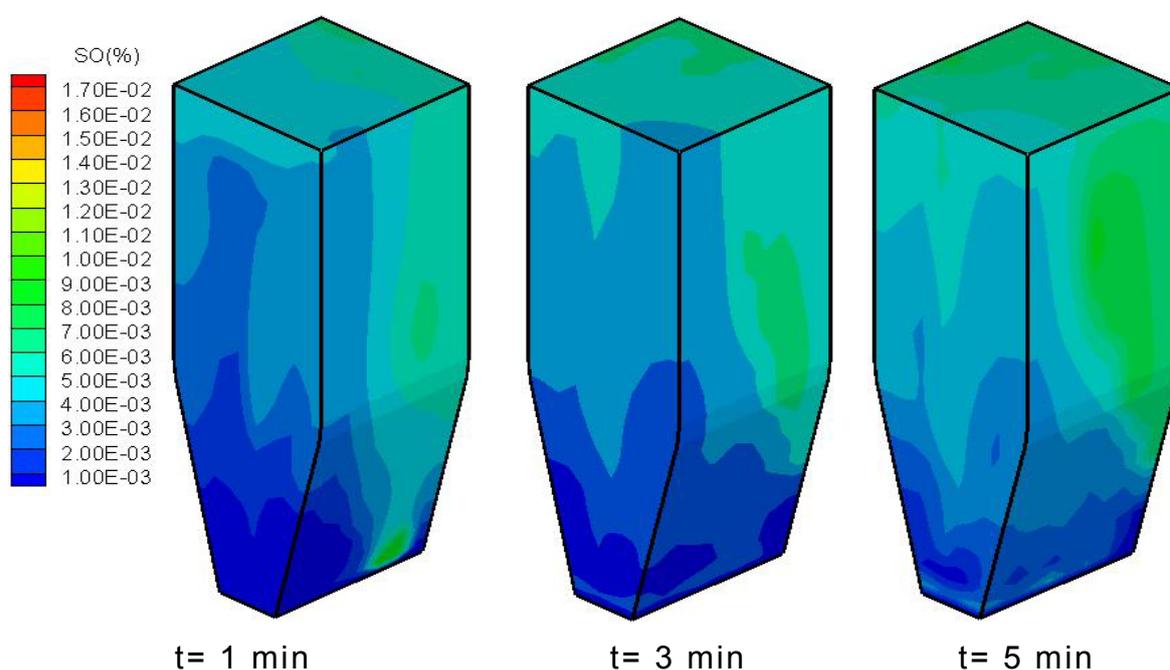


Figura 3.4.4. Comportamento do SO no interior do reator.

A figura 3.4.5 mostra o SO_2 que apresenta uma concentração grande próximo a região de saída dos gases do reator isto pode ser proveniente da reação do SO formado com O_2 . Porém a concentração desse gás tende a valores menores com a evolução temporal e, isto pode ser justificado pela distribuição mais homogênea desse no interior do reator. Ou, ainda pela decomposição em SO por reações competitivas no modelo.

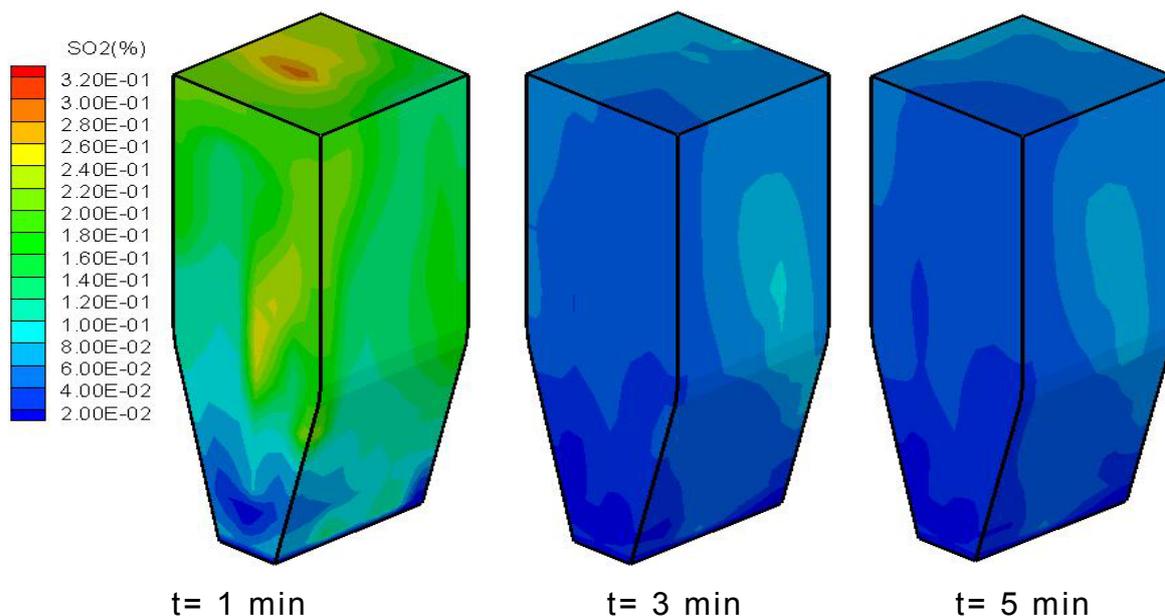


Figura 3.4.5. Comportamento do SO₂ no interior do reator.

A figura 3.4.6 mostra o comportamento do carvão que é alimentado pelo topo há ocorrência de acúmulo no fundo do reator. Esse acúmulo é ocasionado pelo carvão não queimado, mas que começa a reagir ocasionando uma redução da quantidade acumulada. Outro fator para a redução do carvão acumulado no fundo é a recirculação ocasionada pelo arraste com o gás alimentado pelo fundo do reator.

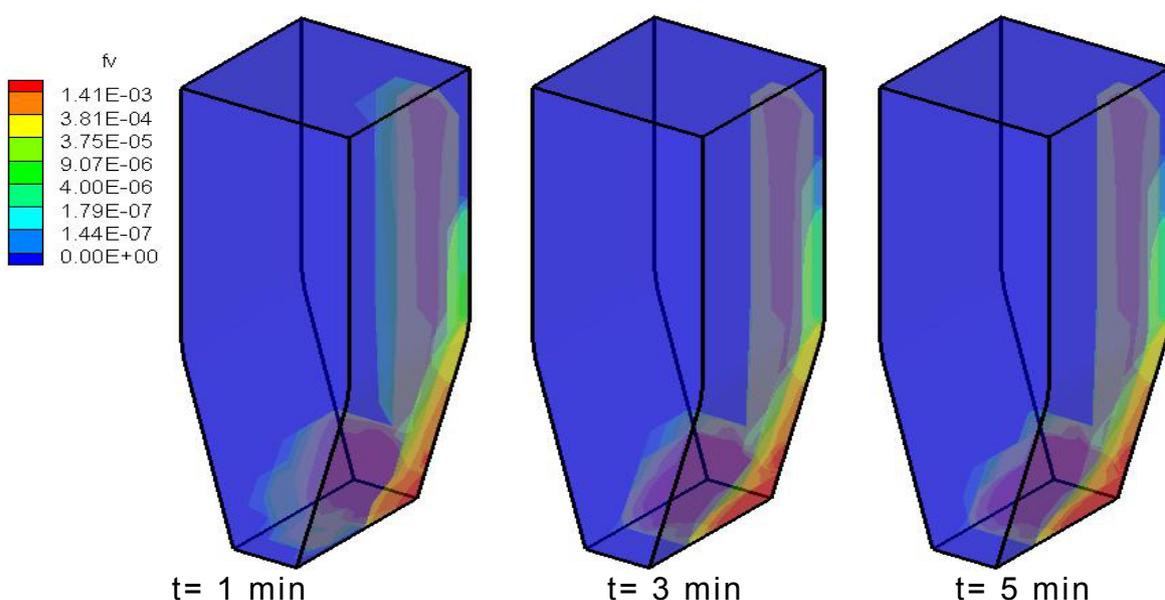


Figura 3.4.6. Comportamento do carvão no interior do reator.

A figura 3.4.7 mostra um gráfico com o comportamento dos gases envolvidos no processo de queima do carvão. O oxigênio é rapidamente consumido nos primeiros minutos de reação devido às reações de queima da matéria volátil. O CO apresenta um comportamento crescente ao longo do tempo devido à reação de combustão parcial do carbono e da matéria volátil que competem com as reações de formação de CO₂. O CO₂ também tem sua emissão reduzida pelas reações que o convertem em CO, seja a com H₂ ou com H₂O. O H₂O apresenta-se com uma concentração bem baixa. A temperatura no interior do reator apresenta para os instantes iniciais um comportamento de elevação depois queda que pode ser explicado pelo inicio das reações que retiram calor do ambiente reacional, depois que as reações de queima se estabilizam ela começa elevar se novamente

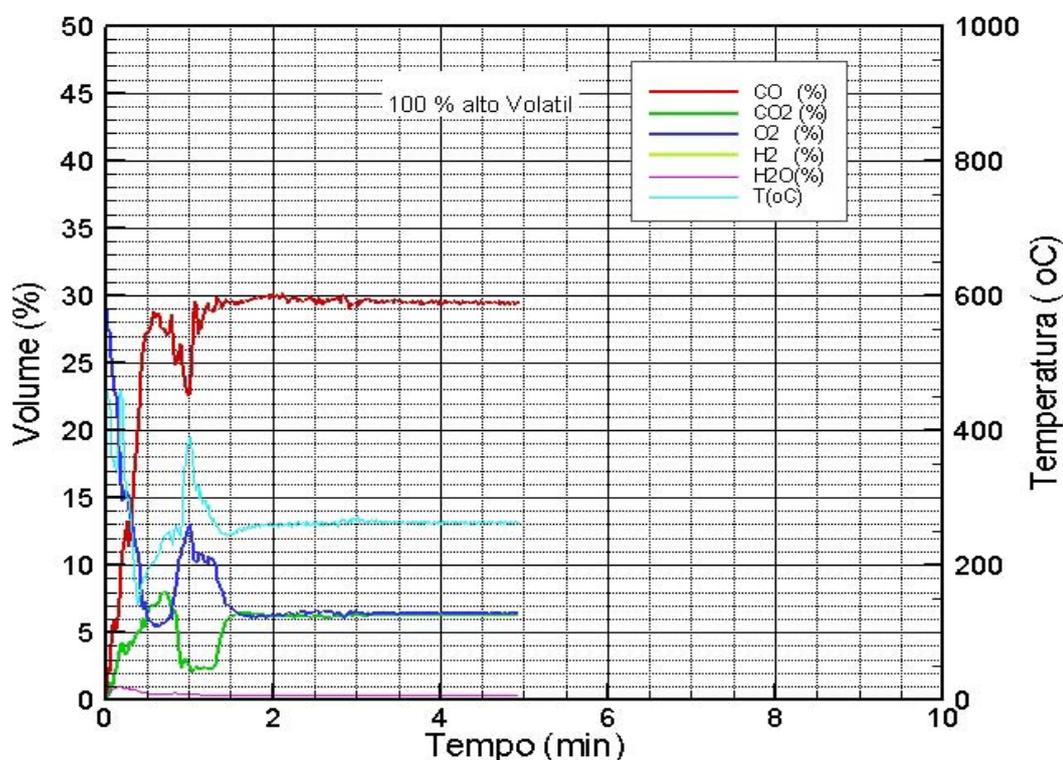


Figura 3.4.7. Comportamento dos gases de combustão em função do tempo de reação.

A figura 3.4.8 é mostrada a variação da distribuição de CO no interior do reator para a queima de carvão com menor teor de

voláteis. Observa-se um acúmulo desse gás no fundo na região onde provavelmente se tem acúmulo de carvão não queimado. O aumento concentração em função do tempo reacional no início basicamente tem-se a liberação de CO pela reação de combustão parcial da matéria volátil. Para tempos posteriores o aumento da concentração se dá pelas outras reações de queima do carbono consideradas no modelo e que foram previamente citadas.

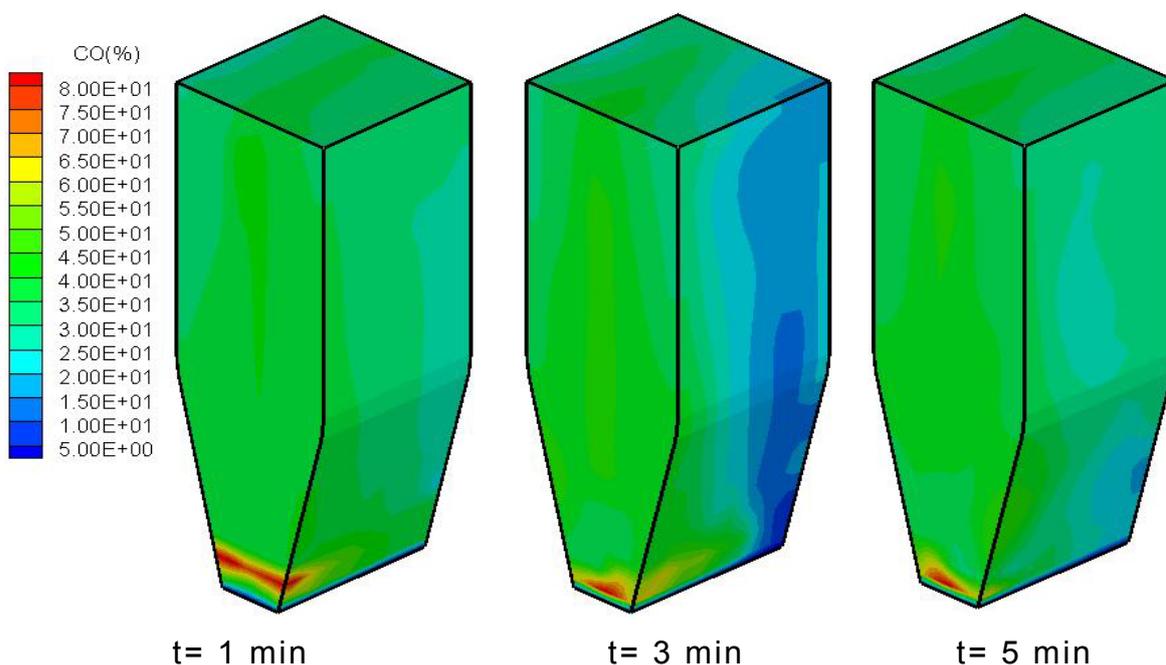


Figura 3.4.8. Comportamento do CO resultante da combustão no interior do reator.

Na figura 3.4.9 pode se observar a variação na distribuição do CO_2 no interior do reator. Observa-se uma maior concentração desse produto da combustão na região oposta a de alimentação e acúmulo do carvão isto devido, principalmente, a combustão total do carbono do carvão. A concentração de CO_2 diminui por causa da conversão do gás carbônico em monóxido de carbono, CO, pela reação de “solution loss”. Como as reações de combustão total e parcial são competitivas a menor quantidade desse gás na região de alimentação é porque a cinética de formação desse composto é menor que a do CO.

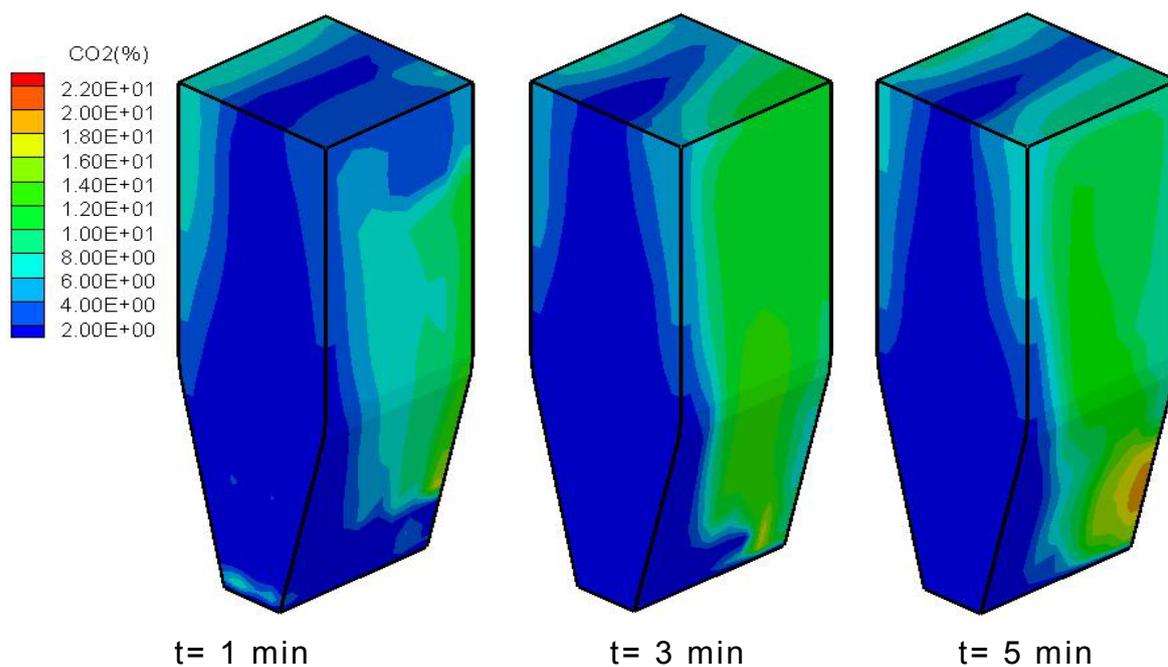


Figura 3.4.9. Comportamento do CO₂ resultante da combustão no interior do reator.

A distribuição de vapor d'água pode ser visualizada na figura 3.4.10. A maior concentração se dá na região próxima do caminho do carvão onde a maior parte da umidade é então liberada.

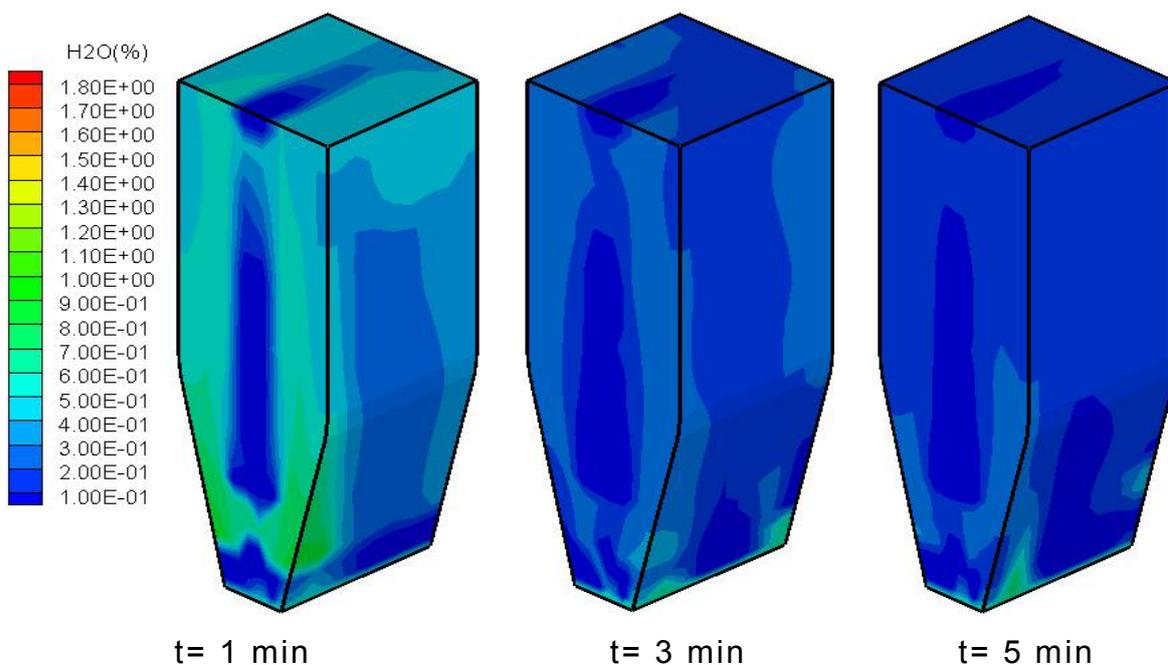


Figura 3.4.10. Comportamento do vapor d'água no interior do reator.

As figuras 3.4.11 e 3.4.12 mostram a distribuição dos gases sulfonados, SO e SO₂ em função do tempo de reação. Pode se observar que para o SO a região onde a acúmulo de carvão libera um pouco mais desse gás, fato este ocorrendo no início do processo. Para o SO₂, porém um ligeiro momento é observado para tempos maiores explicando se pela conversão do SO com o O₂ disperso no ambiente reacional.

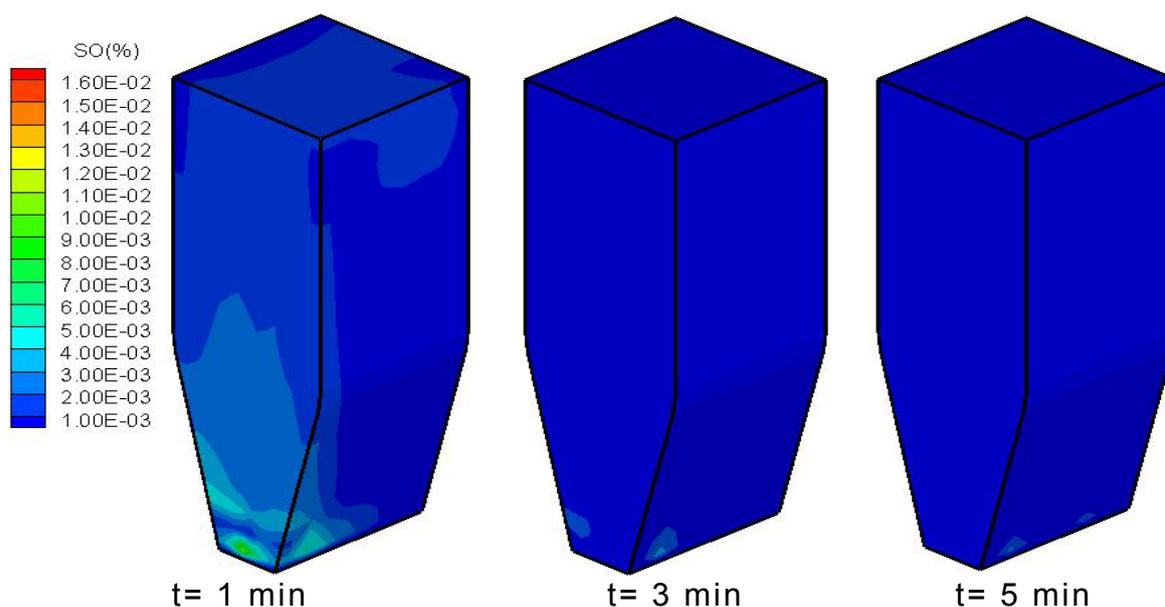


Figura 3.4.11. Comportamento do SO no interior do reator.

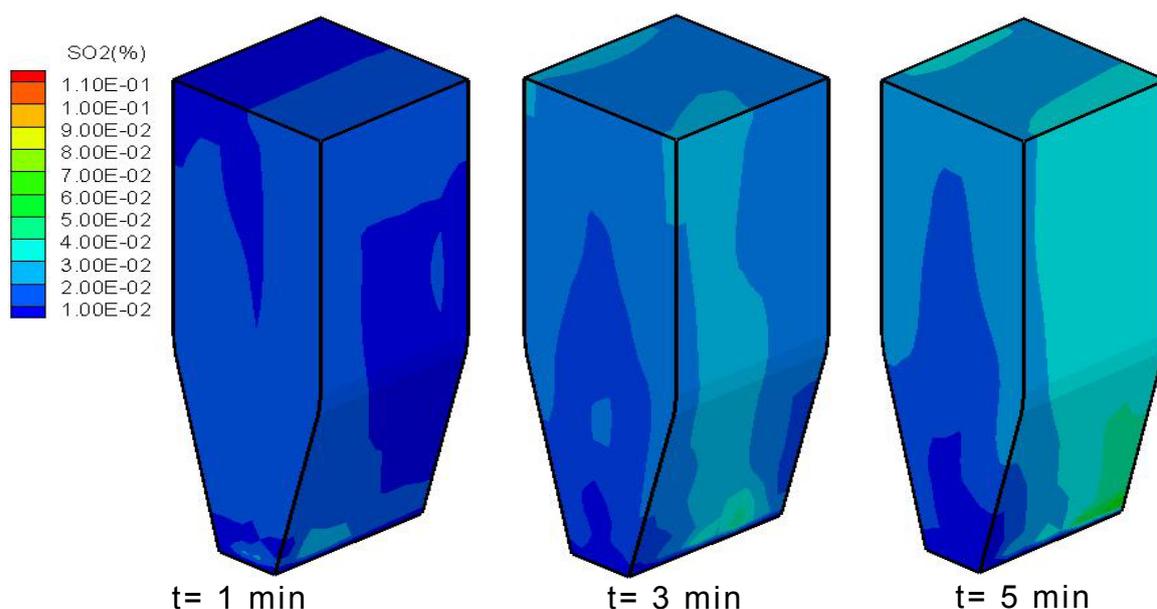


Figura 3.4.12. Comportamento do SO₂ no interior do reator.

A figura 3.4.13 mostra o comportamento do carvão no interior do reator apresentando um considerável acúmulo do carvão não queimado ainda no fundo do reator de leito fluidizado. Isto pode acarretar um problema de operação do leito que pode ter a queda de pressão da operação aumentada causando uma instabilidade na operação do reator.

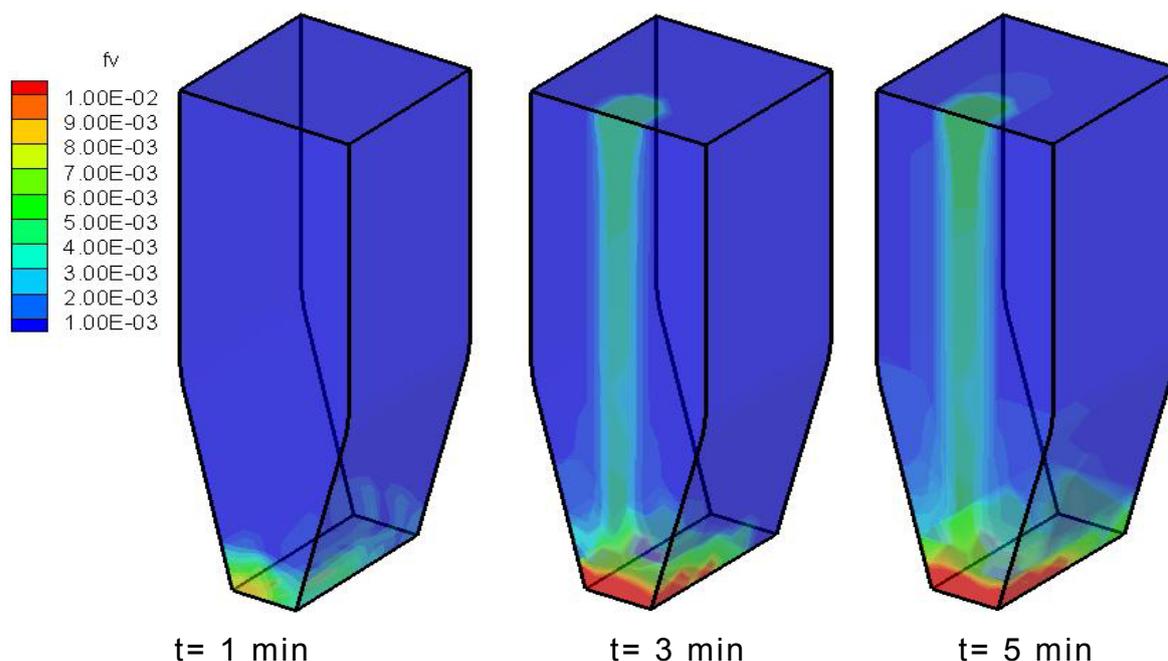


Figura 3.4.13. Comportamento do carvão no interior do reator.

Na figura 3.4.14 é mostrado um gráfico dos gases reacionais, pode se ver que o oxigênio tem seu maior consumo nos instantes iniciais do processo, devido principalmente a evolução da matéria volátil. O CO apresenta-se com oscilação nos primeiros minutos devido também ao processo de devolatilização, depois a concentração desse gás tende a se manter estável. O CO₂ apresenta uma pequena oscilação de concentração, mostrando que o comportamento da cinética reacional para o CO₂ não é tão grandemente afetada pela quantidade de matéria volátil como a apresentada para CO. O vapor d'água se mantém, aproximadamente, constante durante todo o tempo, enquanto o SO e SO₂, que não são apresentados no gráfico por apresentarem concentrações muito

baixas, se mantêm constantes e aproximadamente iguais durante todo o tempo reacional analisado.

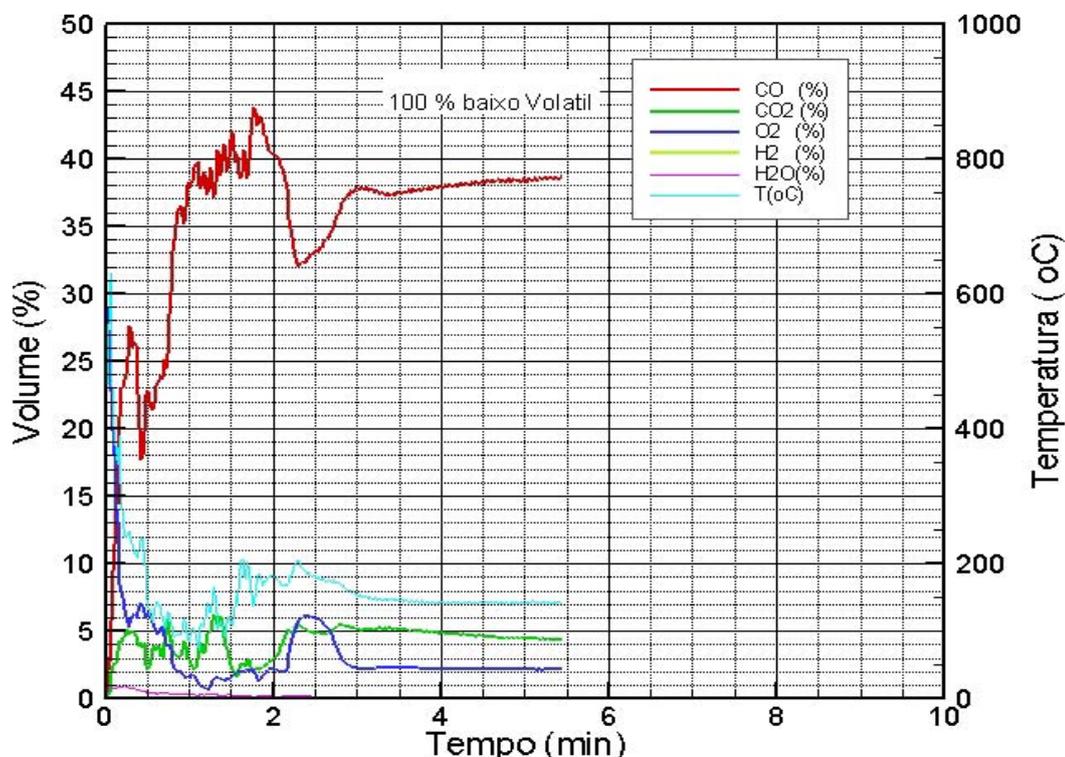


Figura 3.4.14. Comportamento dos gases de combustão em função do tempo de reação.

Os resultados mostrados a partir daqui referem-se à combustão conjunta dos dois carvões, os quais são injetados simultaneamente no reator. Os carvões são citados em seções anteriores e suas características podem ser vistas na tabela 3.4.1. A razão utilizada foi de 50% de cada mantendo sempre como base a quantidade operacional de injeção de combustíveis que é de 40 kg/h. As condições de operação do processo foram mantidas conforme apresentadas anteriormente e podem ser visualizadas na tabela 3.4.2. A figura 3.4.15 mostra o comportamento do CO alguns minutos após o início da injeção de carvão no reator. O comportamento apresentado no reator demonstra uma maior liberação de CO na região de alimentação do carvão de maior teor de voláteis. Como era de se esperar pelo fato das reações ocorrerem mais rapidamente devido à evolução dos voláteis favorecerem o início da combustão da

massa de carvão. A figura 3.4.16 abaixo mostra o comportamento do CO_2 que tem sua região de maior concentração entre as alimentações de carvão isto se dá devido ao fato do CO liberado pela queima dos voláteis reagirem com O_2 formando dióxido de carbono. As outras reações de queima do combustível injetado também contribuem para o aumento da concentração do CO_2 nessa região.

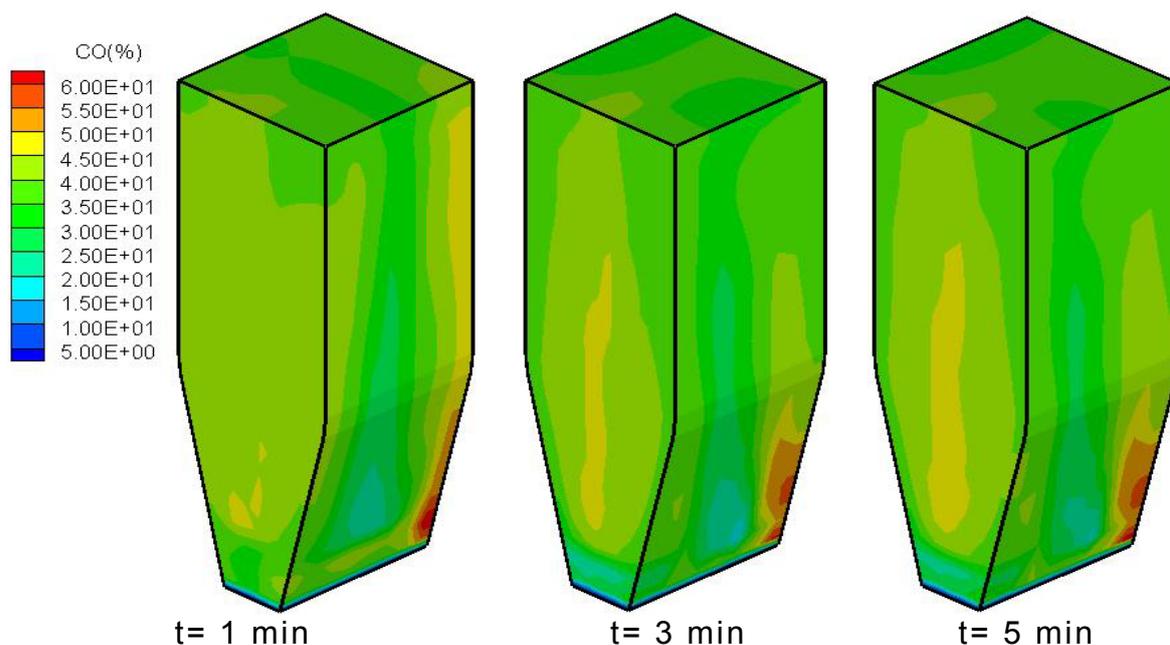


Figura 3.4.15. Comportamento do CO resultante da combustão.

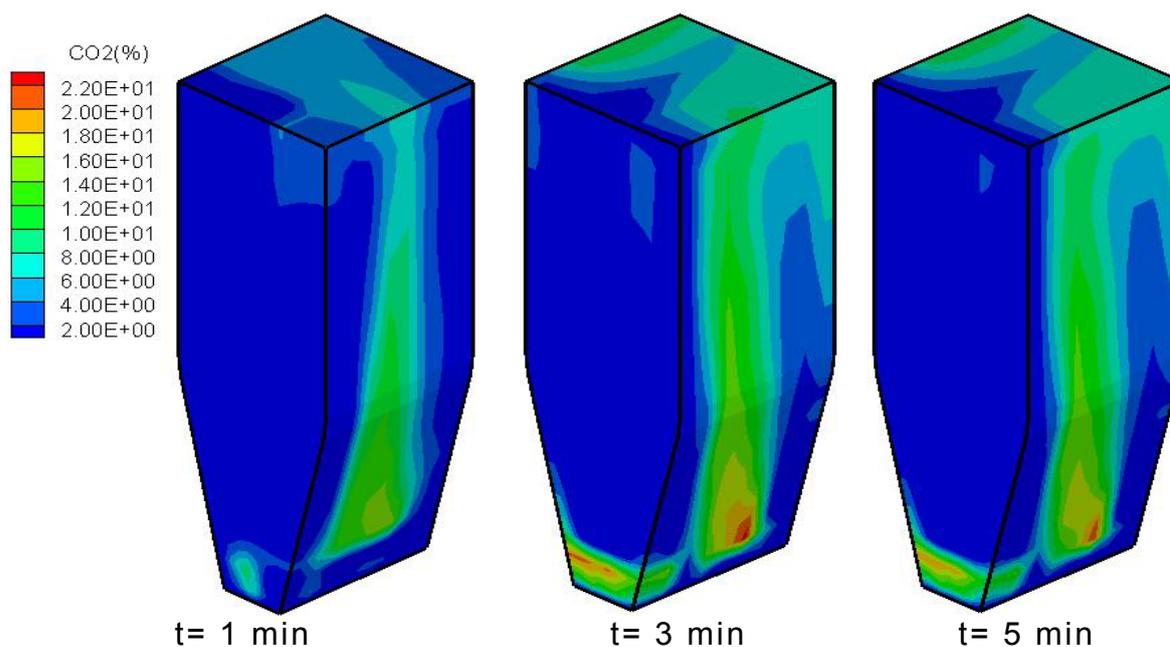


Figura 3.4.16. Comportamento do CO_2 resultante da combustão.

Na figura 3.4.17 pode ser visto o comportamento da variação da concentração do vapor d'água no interior do combustor de leito fluidizado. Observa-se que a maior concentração se dá na região de alimentação do carvão importado, isto se deve a perda de umidade desse carvão, fato ocorrido devido à elevada temperatura interna do reator e do gás de reação que no início do processo é de 850°C .

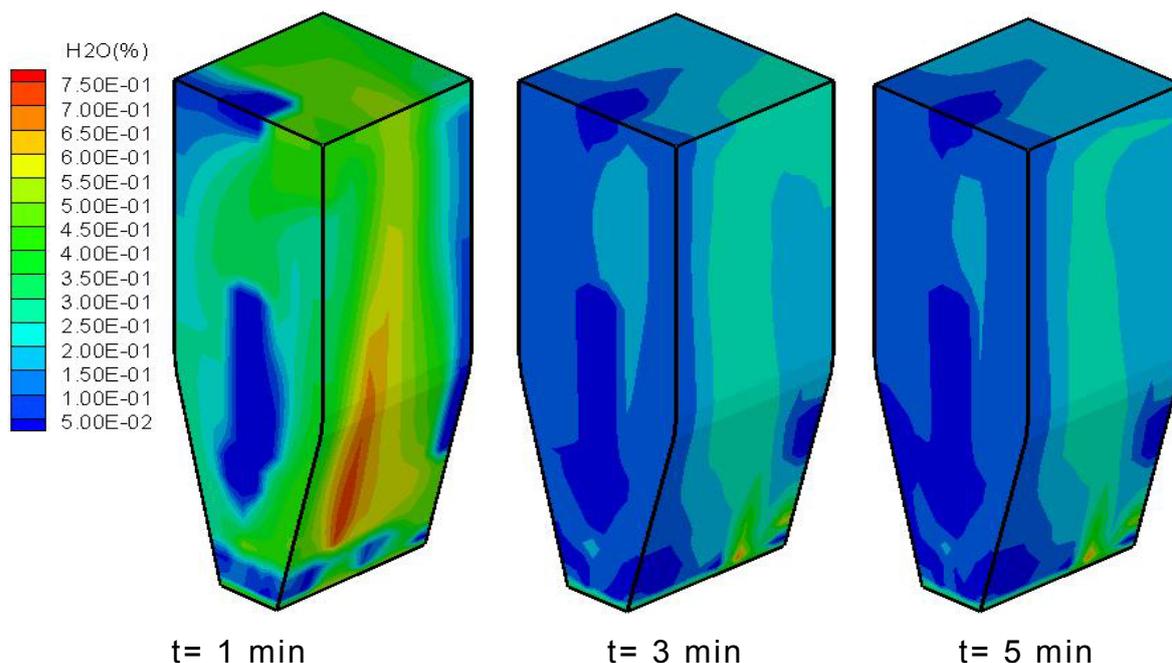


Figura 3.4.17. Comportamento do vapor d'água no reator.

A figura 3.4.18 mostra o comportamento na variação da distribuição de concentração do SO, que é um pouco maior na região próxima a alimentação do carvão com mais volátil. Isto é devido principalmente, ao fato das reações de combustão do enxofre orgânico consideradas no modelo seguirem uma cinética similar as reações consideradas para o carbono e serem competitivas. Portanto, a variação na distribuição da concentração de SO₂ é gradativamente aumentada em função do tempo de reação e da razão entre os carvões, o que pode ser visualizado na seqüência de figuras 3.4.19.

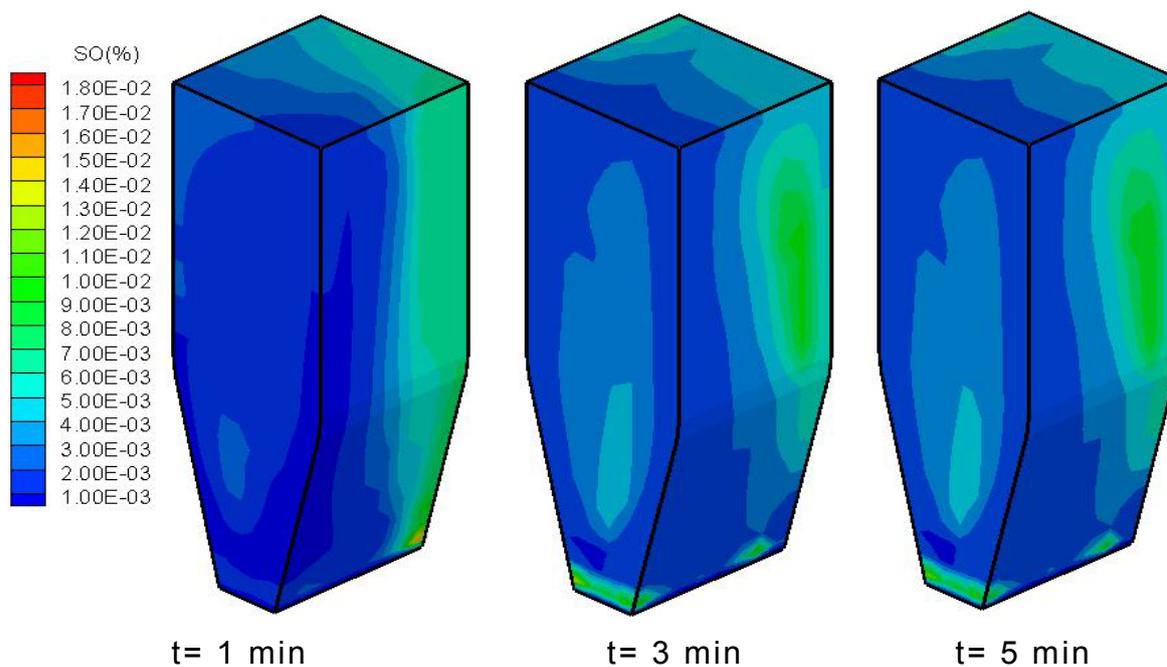


Figura 3.4.18. Comportamento do SO no interior do reator.

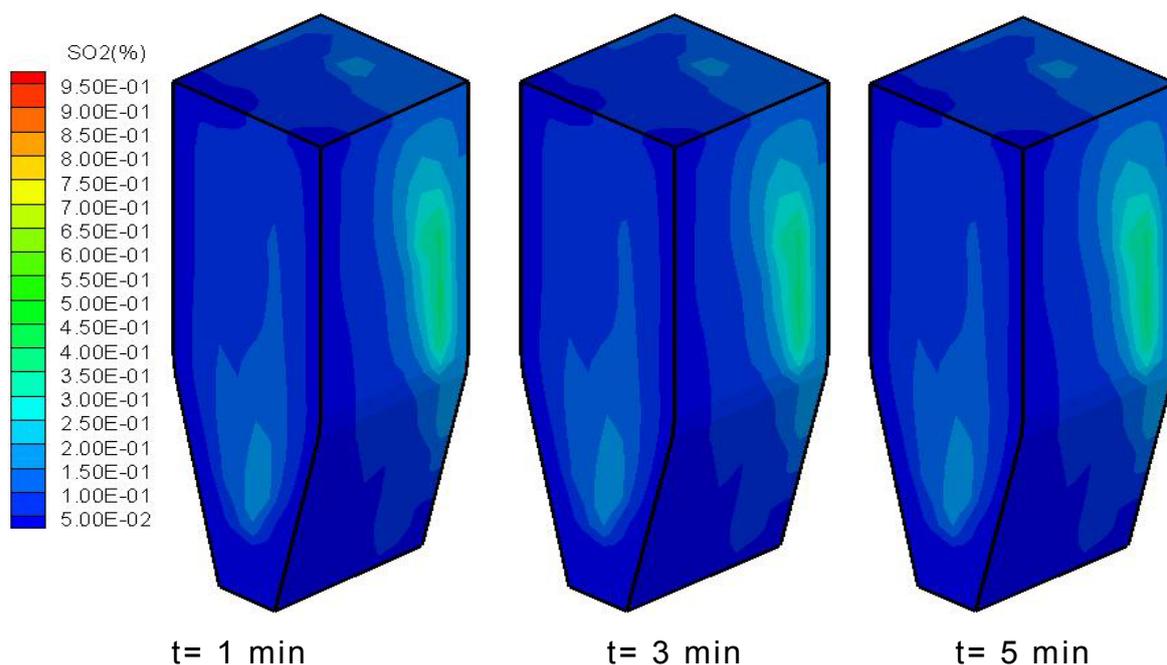


Figura 3.4.19. Comportamento do SO₂ no interior do reator.

Na figura 3.4.20 pode ser visto o gráfico do comportamento dos gases analisados durante a combustão dos carvões usados em reator de leito fluidizado. O oxigênio é consumido rapidamente no início do processo devido às reações de queima da matéria volátil, que causa

um pico na concentração de CO nos instantes iniciais. O CO_2 é liberado rapidamente no começo e depois se mantém aproximadamente constante. A temperatura quando se usa o carvão com menor teor de voláteis tende a uma queda mais brusca no início do processo de queima indicando que o uso isolado deste ou em grandes proporções pode ocasionar um processo instável do ponto de vista térmico. Fato este que não seria interessante visto que o objetivo é a obtenção de um gás termicamente rico para alimentação de uma turbina de geração de energia elétrica.

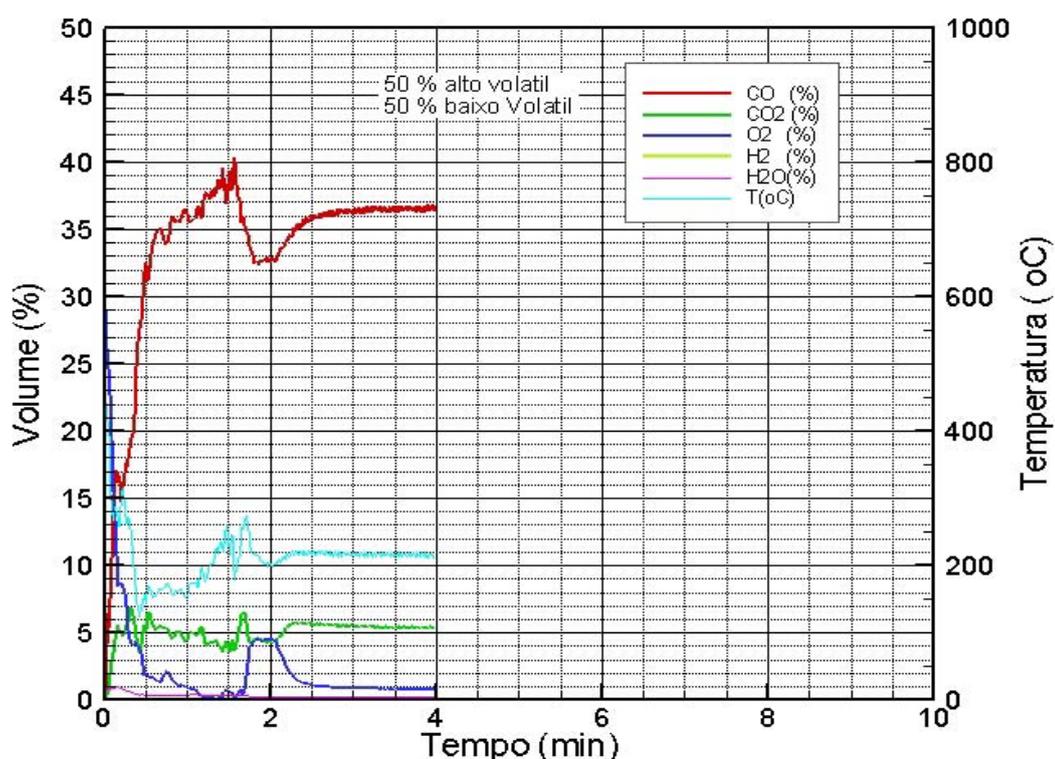


Figura 3.4.20. Comportamento dos gases de combustão em função do tempo de reação.

Os resultados apresentados acima são referentes a alguns ajustes já feitos no modelo, visto que resultados anteriores de combustão apresentaram concentração de gases muito inferiores ao esperado. Portanto a cinética precisou ser ajustada para se aproximar da realidade das emissões nesse tipo de combustor. Outros ajustes são sugeridos principalmente comparando-os com resultados experimentais.

3.4.2- Simulação da combustão de carvões e biomassa

Os resultados apresentados nesta seção seguem as simulações e os parâmetros apresentados na seção anterior, no entanto apresenta-se a queima conjunta de carvões e biomassa.

A figura 3.4.21 a seguir apresenta o comportamento dos gases de saída e a temperatura do reator para a queima de 75% de carvão nacional com 25% de carvão importado. O comportamento está de acordo com o esperado, no entanto ajustes precisam ser feitos para melhor representação do processo de combustão em leito fluidizado.

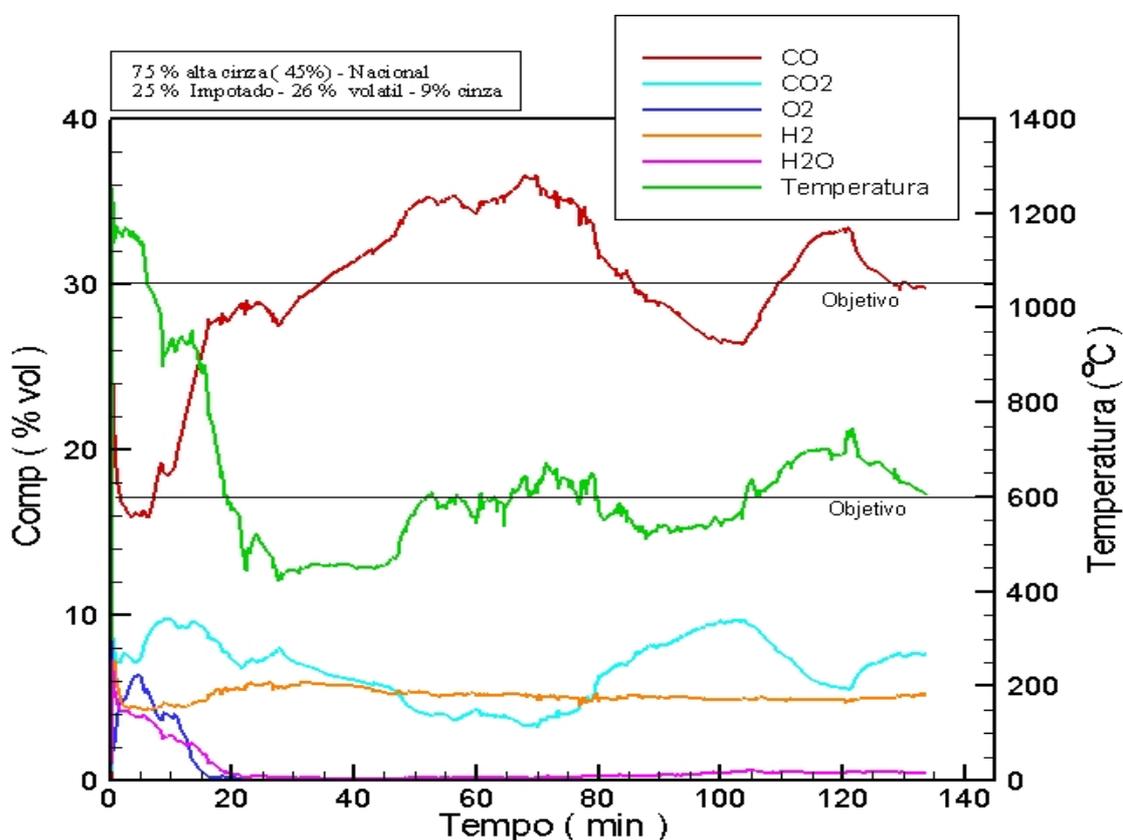


Figura 3.4.21. Comportamento dos gases de combustão e temperatura em função do tempo de reação.

A figura 3.4.22 mostra a taxa de reação da combustão e de produção de gás para a queima de 75% de carvão nacional com 25% de carvão importado. A taxa de combustão atinge o máximo de queima de 60 kg/h, produzindo o máximo de 610 Nm³/h.

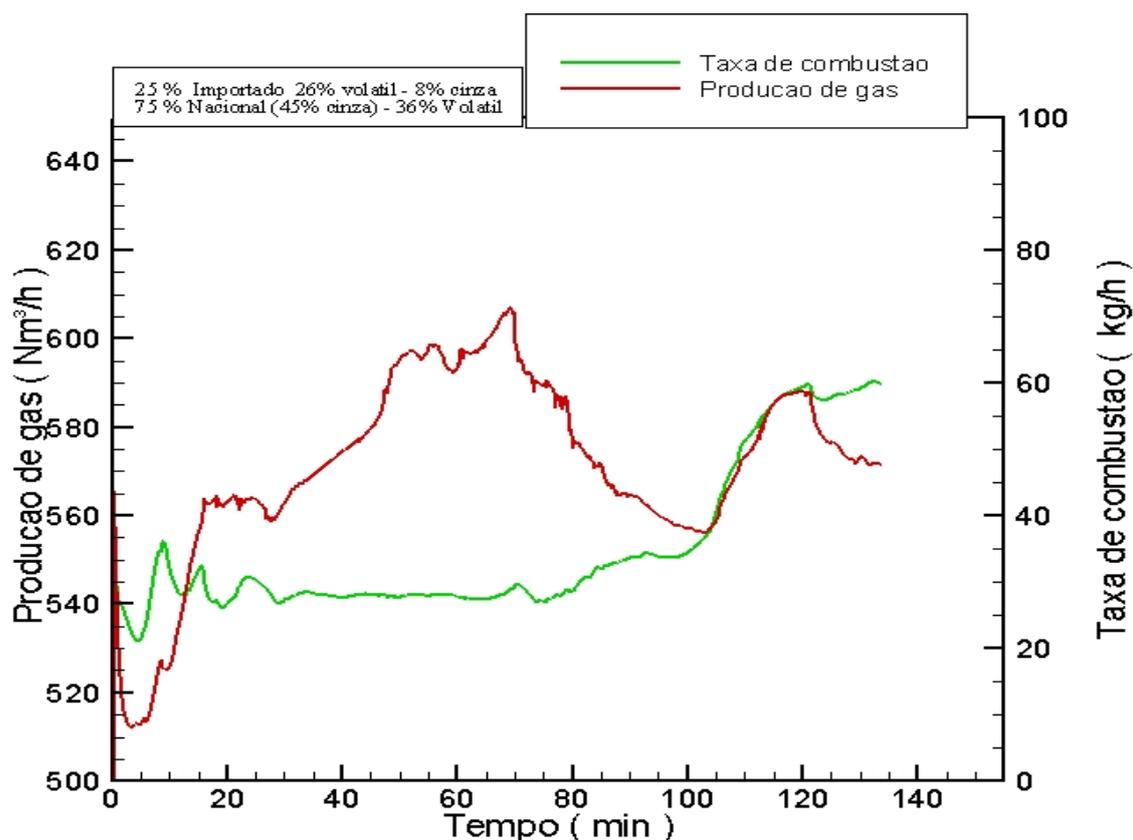


Figura 3.4.22. Taxas de reação em função do tempo de reação.

As figuras a seguir representam a combustão conjunta de carvão e biomassa, que é utilizada na combustão para reduzir a emissão de SO₂ e aproveitamento das plantas a carvão.

A figura 3.4.23 mostra o comportamento da combustão de 75% de carvão nacional e 25% de biomassa as quantidades de CO e a temperatura ficam dentro dos parâmetros objetivados. Onde, o percentual de CO em torno de 30% e a temperatura de saída do gás acima de 600^oC.

A figura 3.4.24 mostra a taxa de combustão de carvão e biomassa para a queima efetuada com 75% de carvão nacional e biomassa. A taxa de carvão alcança valores em torno de 75 kg/h, enquanto a da biomassa fica em torno de 65 kg/h. A produção de gás resultante da combustão chega a valores acima de 570 Nm³/h

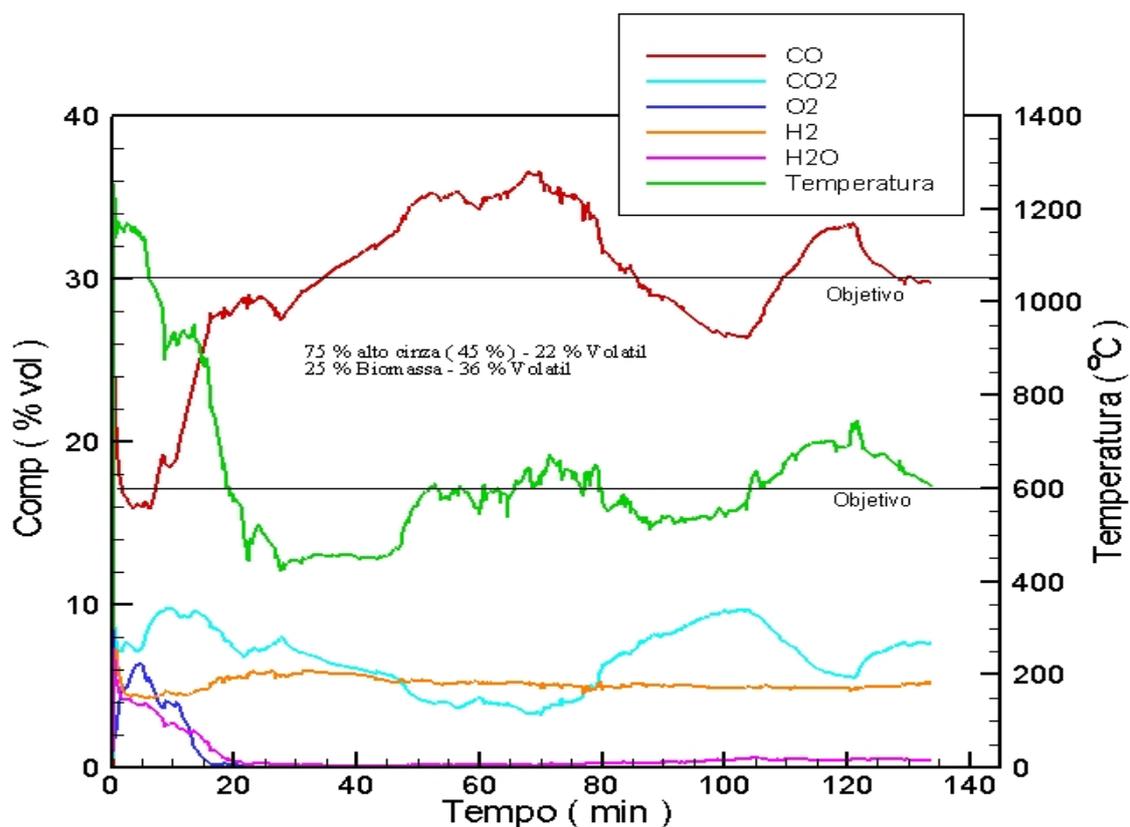


Figura 3.4.23. Comportamento dos gases de combustão e temperatura em função do tempo de reação.

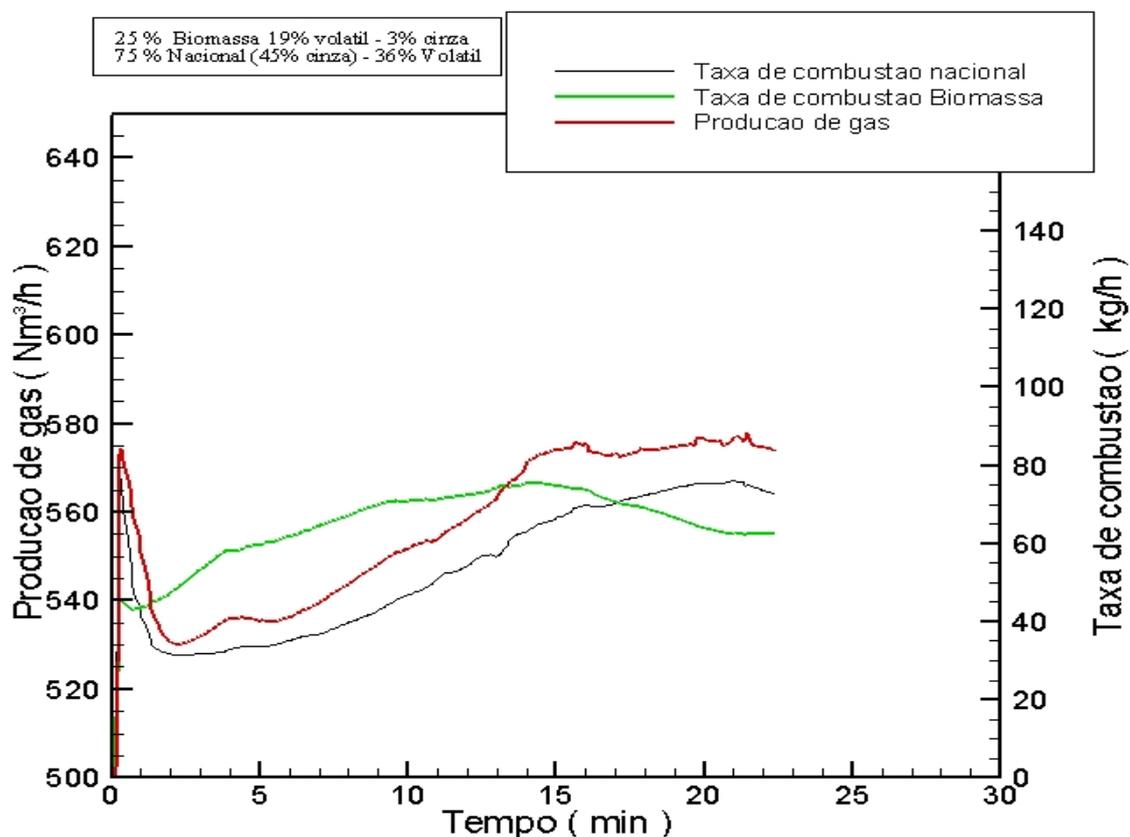


Figura 3.4.24. Taxas de reação em função do tempo de reação.

A figura 3.4.25 mostra comportamento dos gases da combustão e da temperatura e pode-se observar que tanto o CO quanto a temperatura do gás de saída ficam abaixo do valor objetivado. Isto pode ser devido principalmente a elevada umidade da biomassa.

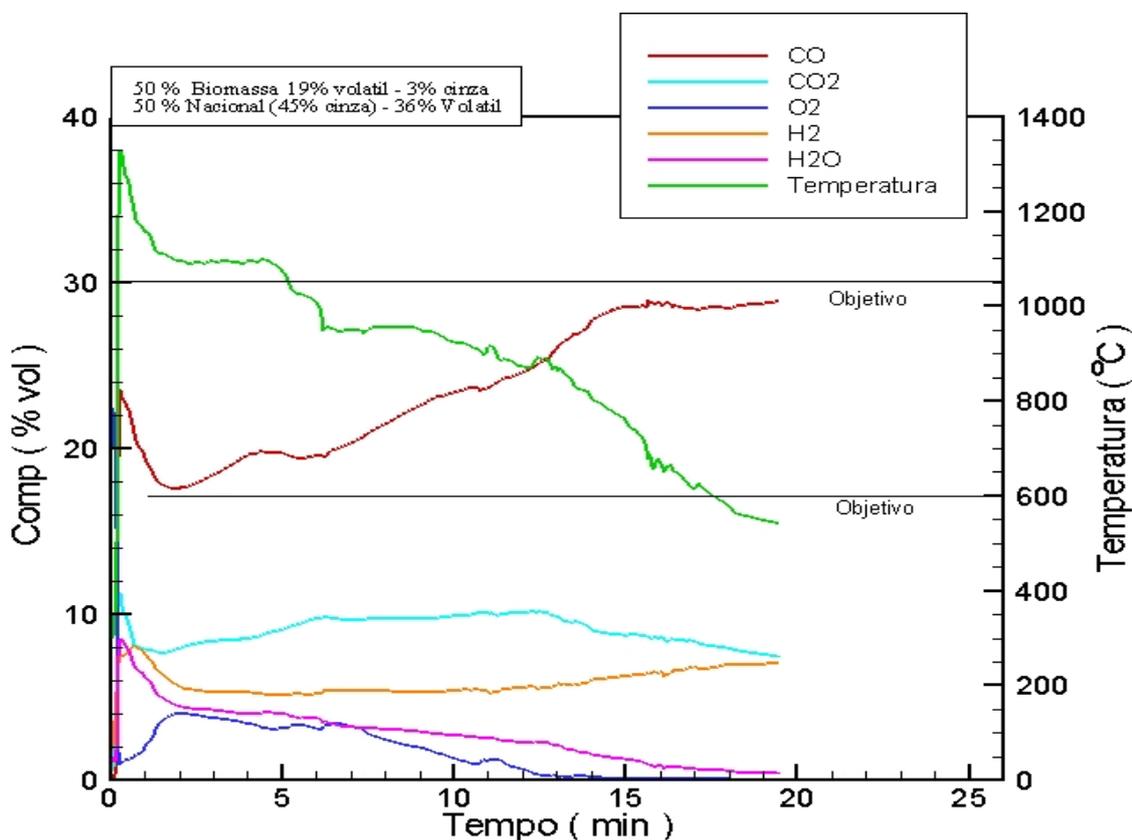


Figura 3.4.25. Comportamento dos gases de combustão e temperatura em função do tempo de reação.

A figura 3.4.26 apresenta a taxa de combustão e a produção de gás. A taxa de biomassa e carvão alcançados, quando se utiliza 50% de carvão e biomassa, é de no máximo 60 kg/h. Enquanto que a produção de gás tem um máximo em torno de 600 Nm³/h e estabiliza-se por volta de 570 Nm³/h.

A figura 3.4.27 apresenta o comportamento dos gases resultantes da queima do enxofre SO e SO₂. O SO₂ atinge valores acima de 100 ppm, enquanto o SO atinge valores pouco acima de 20 ppm.

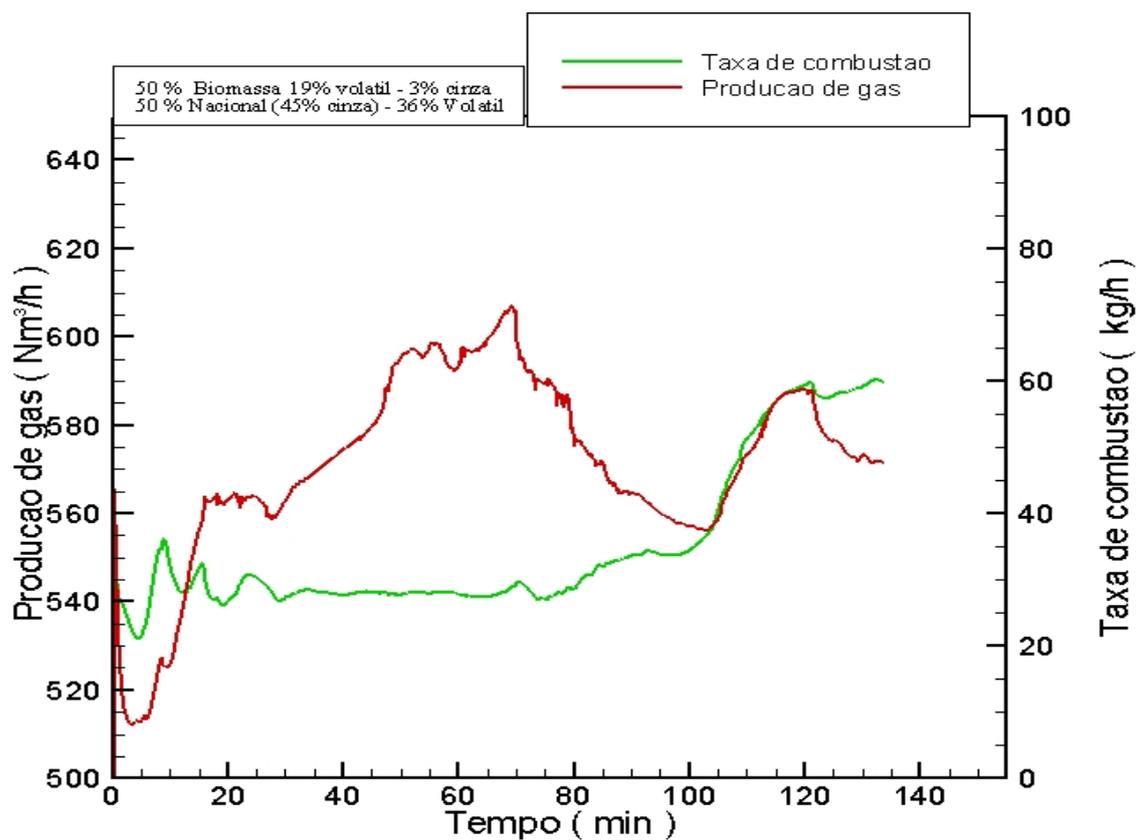


Figura 3.4.26. Taxas de reação em função do tempo de reação.

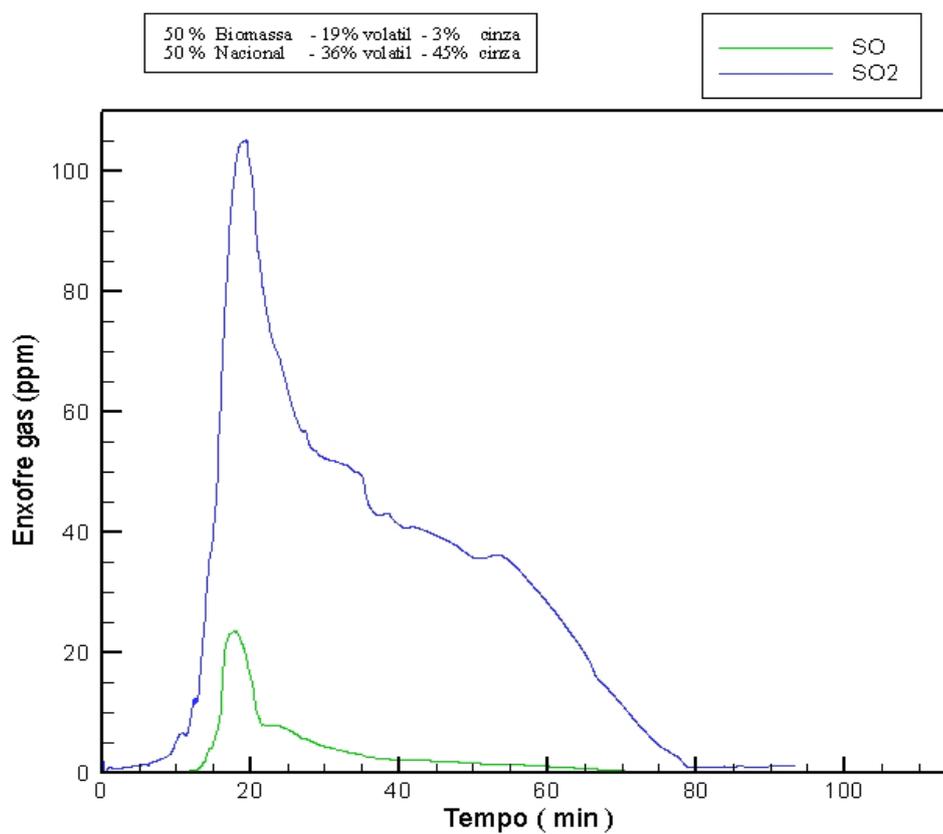


Figura 3.4.27. Comportamento do SO e SO₂.

A figura 3.4.28 mostra a evolução temporal dos gases de combustão e da temperatura para a combustão, em reator de leito fluidizado, de 100% de biomassa como combustível. Os valores de CO e da temperatura ficam abaixo do objetivado, isso porque a biomassa apresenta umidade elevada.

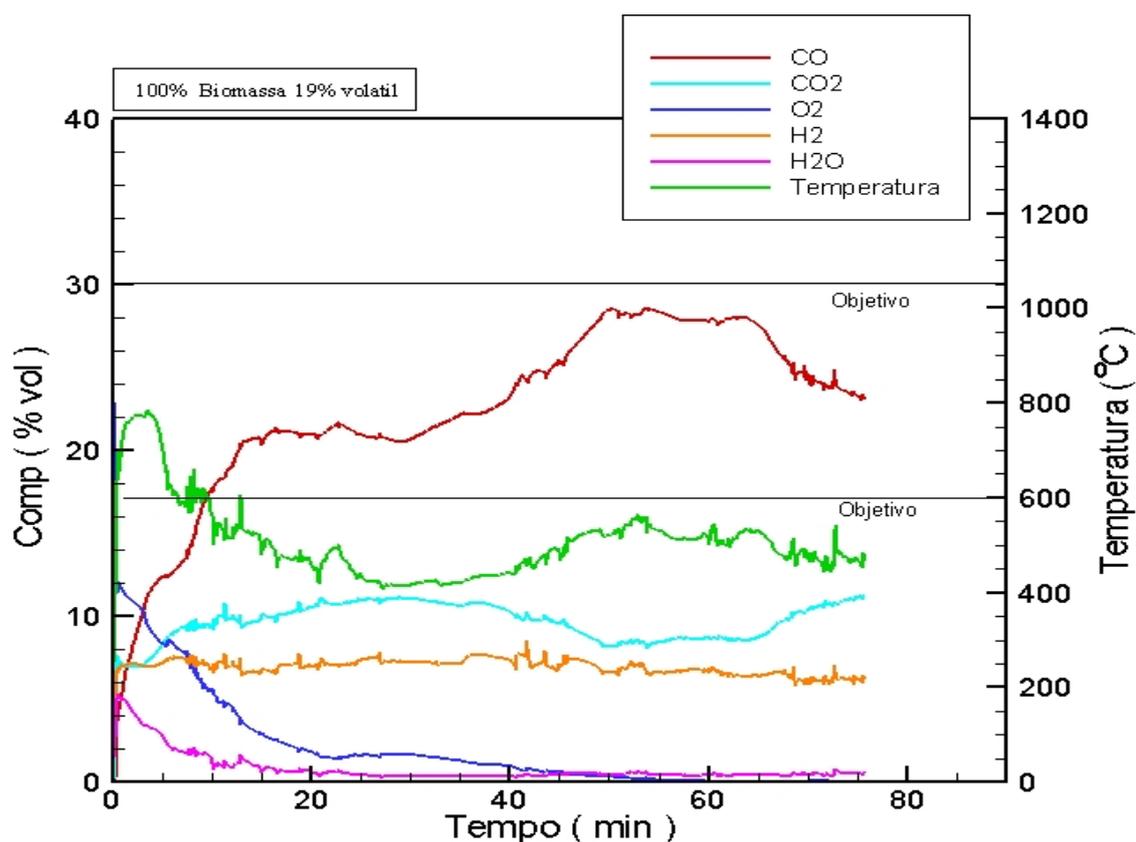


Figura 3.4.28. Comportamento dos gases de combustão e temperatura em função do tempo de reação.

A figura 3.4.29 mostra a taxa de reação para a combustão utilizando 100% de biomassa como combustível, atinge-se um valor máximo de 120 kg/h. A produção de gás resultante da combustão atinge um máximo de aproximadamente 580 Nm³/h e se estabiliza em torno de 550 Nm³/h. A redução aqui se deve a menor combustibilidade da biomassa em relação a queima de carvão, devido ao fato de se apresentar com menor grau de carbonificação e elevada umidade.

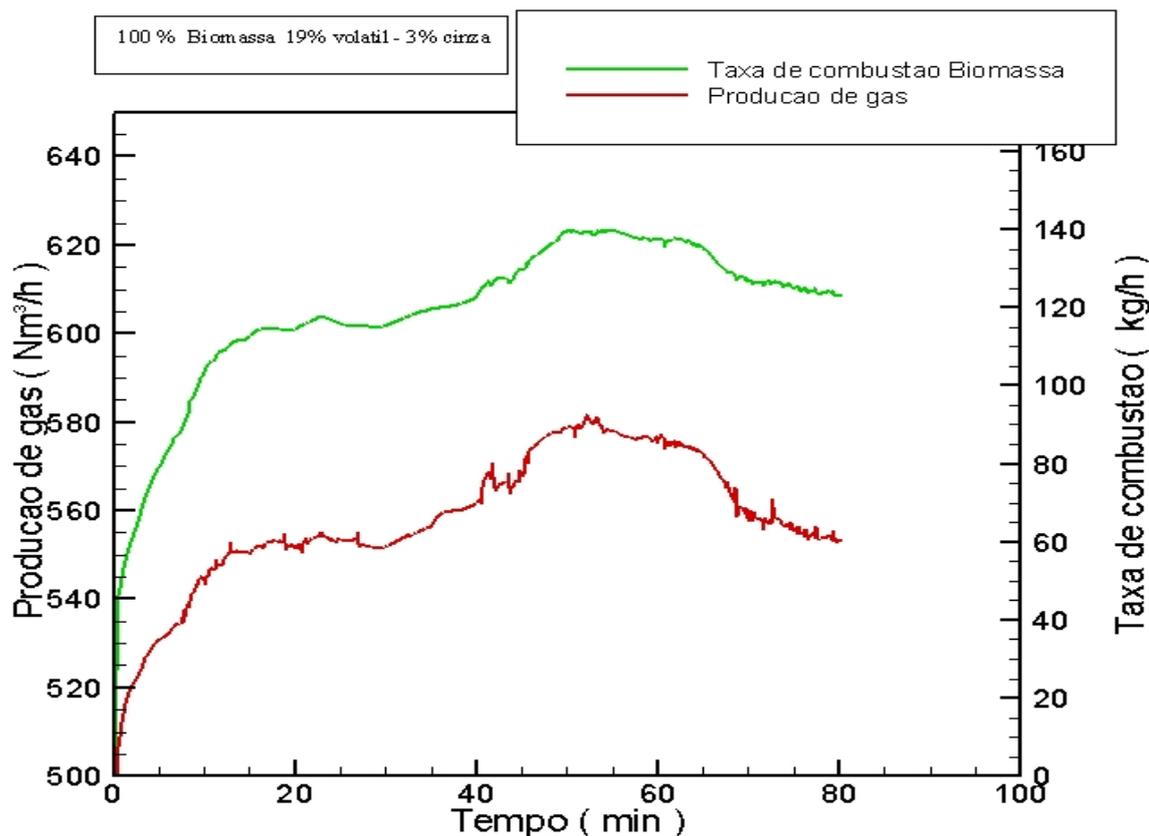


Figura 3.4.29. Taxas de reação em função do tempo de reação.

A seqüência de figuras 3.4.30 mostra a evolução da temperatura do reator de 1 a 60 minutos considerando a combustão da biomassa. As figuras mostram que no início tem se uma temperatura mais elevada próximo ao fundo do reator, devido à presença de areia. A areia é o material inerte presente no reator e que desempenha importante papel na troca térmica, além de desempenhar importante papel fluidodinâmico, pois o fenômeno de fluidização é atingido e estabilizado só com a areia inicialmente. A importância térmica se dá porque o gás ao se resfriar circula para as regiões inferiores do reator e ao entra em contato com a areia em temperatura mais elevada se aquece e volta para as regiões mais altas do reator. Nessas regiões reage com o combustível que é alimentado pelo topo do reator e começa então a ser queimado apresentando um ponto de liberação de calor próximo ao ponto de alimentação do combustível que é alimentado no reator a temperatura ambiente.

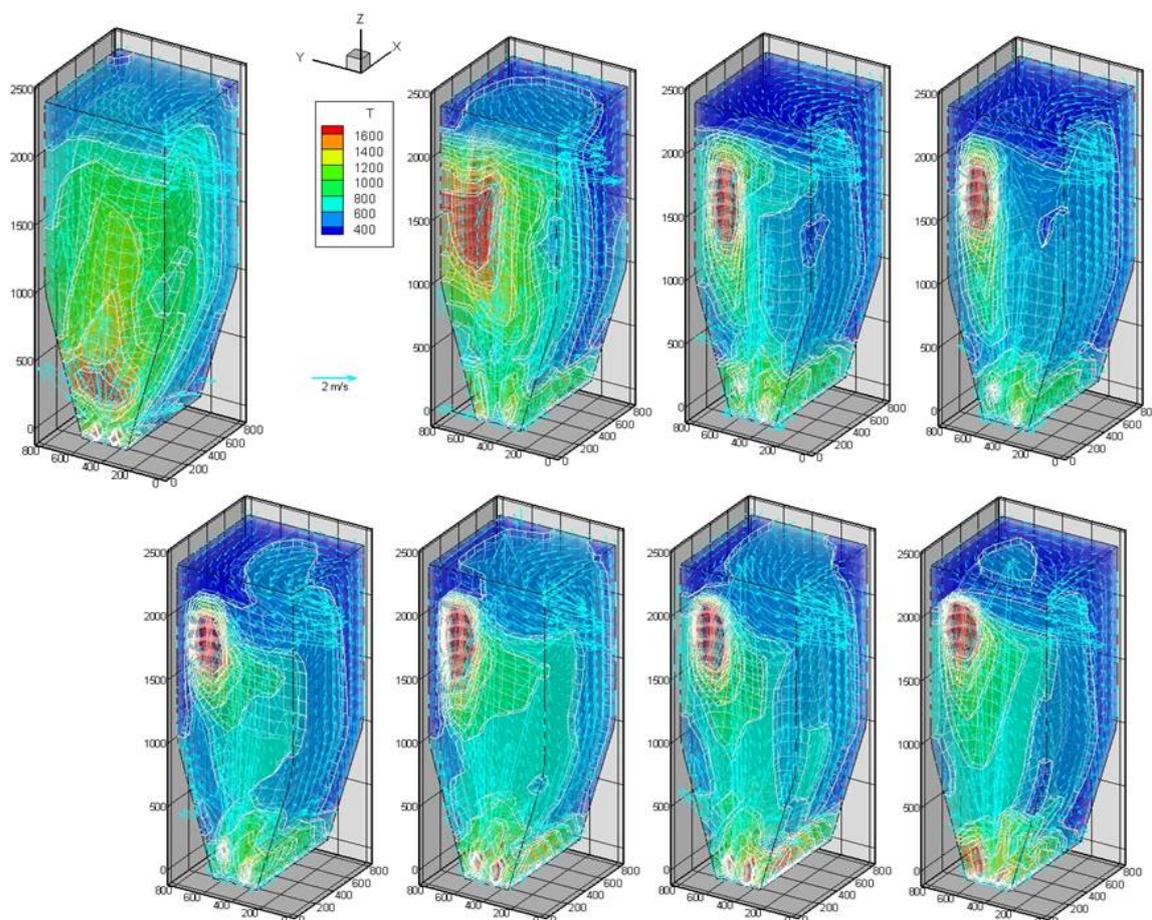


Figura 3.4.30. Evolução da temperatura no interior do reator (1-60 minutos).

A figura 3.4.31 mostra o comportamento das partículas de biomassa no interior do reator que apresenta um acúmulo conforme o combustível vai sendo alimentado no reator. Esse acúmulo oscila devido ao fato do constante consumo pela combustão, alternando com a alimentação contínua. A fração volumétrica de biomassa sofre então contínua variação no interior do reator durante o processo de queima no reator de leito fluidizado. O movimento das partículas mostra que estas são jogadas da região central para as proximidades da parede, devido a localização dos bicos de injeção de gás se localizam nessa região. A velocidade do gás próximo as paredes é menor o que proporciona aglomeração das partículas nessa região aumentando o peso das mesmas fazendo que estas caiam e sejam

novamente arrastadas pelo gás propiciando a recirculação no reator, fato que favorece a queima.

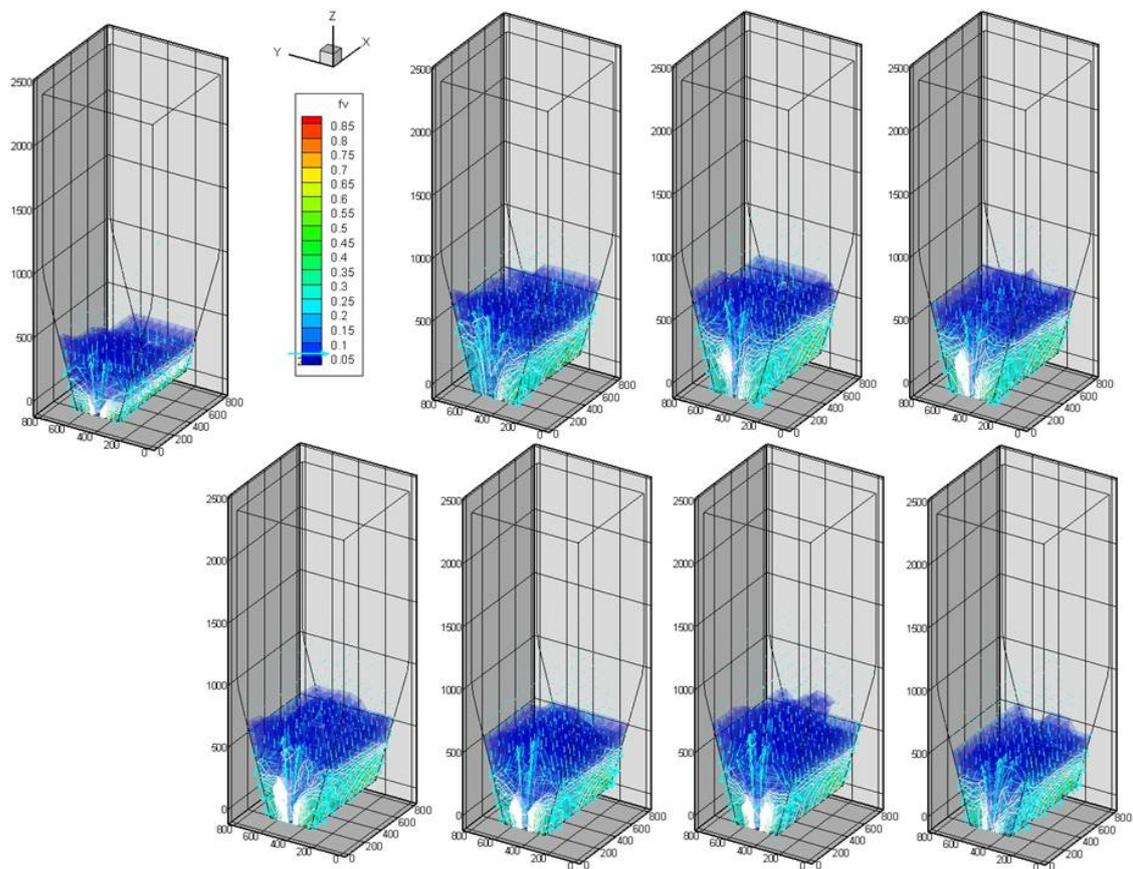


Figura 3.4.31. Fração volumétrica de biomassa no reator (1-60 minutos).

Capítulo 4- Conclusões

Pode-se concluir a partir deste trabalho que um modelo matemático para simulação computacional da combustão de carvões e biomassas em reator de leito fluidizado foi desenvolvido. O modelo desenvolvido leva em consideração a fluidodinâmica do processo acoplado ao fenômeno de fluidização modelos cinéticos das principais reações de processos de combustão. Embora o modelo já tenha sido testado, ele necessita ainda ser validado comparando-se os resultados das simulações com dados experimentais. Esta validação deve ser feita para que os resultados sejam mais confiáveis. Como as cinéticas reacionais são obtidas da literatura e adaptadas de reatores com geometrias e escalas diferentes das utilizadas nas simulações é provável que estas necessitem de correções. As quais produziram resultados mais próximos da realidade do processo. No entanto, os resultados obtidos até o momento se mostraram dentro do esperado e de acordo com resultados previamente verificados na literatura, os quais sempre foram parâmetros para o desenvolvimento do modelo.

O modelo matemático em questão também precisa ser avaliado em termos do tempo de simulação, a necessidade de evolução se dá, porque como o modelo é transiente e em três dimensões o tempo de simulação é relativamente longo. Isto se dá porque tem se a necessidade de se usar um passo “time step” muito pequeno 10^{-3} para que diminua distorções gráficas dos resultados. Outro ponto a

ser avaliado é o uso de malhas mais ou menos refinadas fato que também pode causar distorções na interpretação e valores dos resultados obtidos.

Os resultados obtidos para a fluidodinâmica do fenômeno de fluidização se mostram de acordo com os descritos em vários artigos da literatura didática e científica. Os resultados fluidodinâmicos para o processo de fluidização considerando os parâmetros operacionais analisados apresentaram comportamento condizente com o esperado. A queda de pressão e a taxa de expansão do leito mostraram boa concordância com resultados analisados. Apesar de no modelo em questão o cálculo de ΔP e do H/H_0 sejam calculados de modo diferente do tradicional para o fenômeno. Para taxa de expansão do leito o modelo apresentou a maior variação do resultado experimental por ter sido usado uma equação adaptada para o fenômeno. Esta equação, porém pode ser corrigida para uma melhor aproximação dos resultados apresentados, ou ainda substituída no modelo por uma equação mais adequada, a qual tenha sido desenvolvida para o fenômeno de fluidização. Cabe referenciar aqui os modelos de Syamlal e Gidaspow já citados anteriormente para comparação dos modelos.

A análise de sensibilidade do modelo mostrou que o modelo é muito sensível à variação de parâmetros operacionais e numéricos e a algumas propriedades do material utilizado. Os parâmetros operacionais de velocidade de mínima fluidização e altura de leito apresentaram resultados condizentes com o esperado. O coeficiente de restituição que foi uma propriedade analisada não apresentou qualquer variação. Isto foi porque embora seja um valor utilizado para o cálculo de variáveis do coeficiente de arraste e temperatura granular este valor não é utilizado pela equação de arraste utilizada no modelo. O diâmetro da partícula mostrou que partículas de até 4,5 mm de diâmetro podem ser utilizadas, porém partículas com tamanho de 2,5 mm garantem uma operação mais estável do processo. A malha utilizada para o processo numérico também foi analisada e os

resultados mostraram que malhas mais grosseira apresentam resultados piores, porém podem acelerar as simulações. Os resultados para a malha indicam que se deve analisar muito bem a necessidade de rapidez e exatidão para a escolha da malha para as simulações, pois o uso de malhas grosseiras diminui o tempo de simulação, mas os resultados apresentam valores piores que em malhas mais refinadas.

Os resultados de combustão mostraram-se promissores, porém ajustes ainda são necessários para melhor representação do processo. Os resultados apresentados na seção 3.4.1 já representam alguns ajustes feitos nas cinéticas das reações consideradas no modelo. Esses ajustes foram necessários, porque os modelos cinéticos utilizados foram adaptados de processos e/ou reatores diferentes em geometria, tamanhos e escala do aqui utilizado. Por isso algumas distorções dos resultados esperados, no entanto os valores apresentados, sobretudo para as concentrações de gases foram muito interessantes. Principalmente porque esse gás rico em CO, concentrações acima de 30% em volume, pode ser queimado na câmara de combustão da turbina e gerar um gás com temperatura ainda maior que a da combustão em leito fluidizado. A temperatura observada apresentou-se abaixo da esperada que deveria ser na faixa de 600-900^oC. No entanto esse resultado ainda é muito preliminar, visto que se trata apenas de 5 minutos de processo simulado é possível que a temperatura volte a subir depois que o processo de combustão se estabilize. Ajustes devem ser feito comparando os resultados do modelo em questão com a curva de aquecimento do forno para comparação com o modelo. O ponto a ser ressaltado é que a etapa de aquecimento do reator foi suprimida nessas simulações por demandar um longo período de simulação. Isto também pode ter afetado os resultados de temperatura reacional e deve ser averiguado em simulações posteriores.

A combustão do carvão com menor teor de voláteis não apresentou resultados muito promissores, visto que a temperatura no

início do processo caiu muito. Porém quando é queimado simultaneamente com o de maior teor de voláteis a temperatura cai um pouco menos. Os resultados indicam que esse carvão pode ser queimado em reator de leito fluidizado, no entanto em razões menores que 50% que foi a utilizada nos resultados apresentados. Outras simulações devem ser feitas para encontrar a melhor proporção e eficiência de queima, bem como temperaturas mais altas do gás de saída do reator.

As emissões de SO e SO₂ foram bem baixas e pode ainda ser utilizada a queima de carbonato de cálcio para a captura desses gases. O que já se encontra implementado no modelo, mas não foi possível ainda obter resultados, devido à necessidade de se ajustar e estudar um pouco melhor a cinética dessa reação para uso efetivo.

As reações do nitrogênio também precisam ser mais bem analisadas e estudadas para uso no modelo, visto que as implementadas não funcionaram conforme esperado. A cinética precisa de ajustes e de melhor estudo, pois foram retiradas da literatura para um reator em escala de laboratório e não responderam bem no processo em questão. Ocasionalmente uma instabilidade nos parâmetros térmicos do modelo, fato este que requer um estudo mais detalhado e minucioso dessas reações e a possível substituição dos modelos usados por outros.

O modelo desenvolvido, como dito anteriormente, precisa ainda de ajustes para ser utilizado com confiabilidade e eficácia, porém os resultados apresentados até o momento são promissores. Indicando que após a validação do modelo é uma linha de pesquisa a ser desenvolvida e com muitos ramos para serem estudados ainda. Torna se importante também pelo apelo, ao desenvolvimento de tecnologias de geração de energia e ao uso de carvões nacionais nesses processos.

Capítulo 5- Sugestões para trabalhos futuros

Com o intuito de dar prosseguimento ao estudo em questão este capítulo visa sugerir seqüência de estudos para melhoria do modelo e avanço técnico e científico do programa de pós-graduação em engenharia metalúrgica (PPGEM). O primeiro passo a ser dado na seqüência desse trabalho é a validação, onde resultados do modelo serão ajustados e comparados a dados de processo. A seguir deve se avaliar os modelos cinéticos das reações que não apresentaram resultados satisfatórios, reações do nitrogênio e enxofre.

Do ponto de vista fluidodinâmico algumas questões devem ser analisadas e inseridas ao modelo: 1) a formação de bolhas, pois determinam e influencia tanto na dinâmica dos fluidos no reator quanto na cinética; 2) o coalescimento e crescimento de bolhas no reator; 3) a velocidade de subida das bolhas. Outro ponto a ser abordado é a formação de aglomerados “clusters” no interior do reator.

Pela ótica numérica sugere-se a evolução dos métodos utilizados, ou o uso associado de outras técnicas computacionais como computação em paralelo e técnicas de multigrid para ganho de tempo, eficiência e confiabilidade do modelo e resultados.

A análise da geração de resíduos, principalmente cinzas também deve ser analisada introduzindo-se uma nova fase ao modelo.

Nos gases de combustão pode ser também introduzido a cinética de combustão de dioxinas e furanos que são substâncias tóxicas liberadas durante a queima de combustíveis fósseis.

Capítulo 6- Referências bibliográficas

ADÁNEZ et al., *Modeling of sulfur retention in circulating fluidized bed combustors*, Fuel, vol. 75, N° 3, p. 262-267, 1996.

AHUJA, G. N., PARTWARDHAN, A. W., *CFD and experimental studies of solids hold-up distribution and circulation patterns in gas-solid fluidized beds*, Chemical Engineering Journal doi: 10.1016/j.cej, 2008.03.011, 2008.

BALTAZAR, A.W.S., *Modelamento matemático e simulação computacional de um Ensaio de combustão de carvão pulverizado*, Escola de Engenharia Industrial metalúrgica de Volta Redonda, Universidade Federal Fluminense, Rio de Janeiro, Dissertação de Mestrado, 2004.

BASU, P., *Combustion of coal in circulating fluidized- bed boilers: a review*, Chemical Engineering Science, vol. 54, p. 5547-5557, 1999.

BAKKER, R. R., JENKINS, B. M., WILLIAMS, R. B., *Fluidized bed combustion of leached rice straw*, Energy & Fuels, vol. 16, p. 356-365, 2002.

BI, H. T., et al., *A state-of-the-art review of gas-solid turbulent fluidization*, Chemical Engineering Science, vol. 55, p. 4789-4825, 2000.

BITTANTI, S. et al., *A model of a bubbling fluidized bed combustor oriented to char mass estimation*, IEEE Transactions on control systems technology, vol. 8, N° 2, p. 247-256, Março 2000.

- CASTRO, J.A., *A multi-dimensional transient mathematical model of blast-furnace based on multi-fluid model*, Institute for advanced material processing, Tohoku University, Japan, Ph.D. Thesis, 2000.
- DAW, C. S. et al., *Characterizing the hydrodynamics of bubbling fluidized beds with multivariate pressure measurements*, Aiche annual meeting, Los Angeles, USA, 2000.
- DESROCHES-DUCARNE, E. et al., *Modelling of gaseous pollutants emissions in circulating fluidized bed combustion of municipal refuse*, Fuel, vol. 77, N° 13, p. 1399-1410, 1998.
- DING, J., GIDASPOW, D., *A bubbling fluidization model using kinetic theory of granular flow*, AIChE Journal, vol.36, N° 4, p. 523-538, Abril 1990.
- FOGLER, H. S., *Elementos de engenharia das reações químicas*, LTC editora S.A., 3ª ed., cap. 12, p. 678-741, 2002.
- GARCÍA-LABIANO, F., HAMPARTSOUMIAN, E., WILLIAMS, A., *Determination of sulfur release and its kinetics in rapid pyrolysis of coal*, FUEL, N° 7, vol. 74, p. 1072-1079, 1995.
- GIDASPOW, D., 1994, *Multiphase flow and fluidization: Continuum and kinetic theory descriptions*, Academic press, San Diego.
- GLICKSMAN, L., CARR, E., NOYMER, P., *Particle injection and mixing experiments in a one-quarter scale model bubbling fluidized bed*, Powder Technology, N° 180, p. 284-288, 2008.
- GOLDSCHMIDT, M.J.V., KUIPERS, J.A.M., van SWAAIJ, W.P.M., *Hydrodynamic modelling of dense gas-fluidised beds using the kinetic theory of granular flow: effect of coefficient of restitution on bed dynamics*, Chemical Engineering Science, N° 56, p. 571-578, 2001.
- GUNGOR, A., *Analysis of combustion efficiency in CFB combustors*, Fuel (2007), doi: 10.1016/j.fuel.2007.06.005
- GUNGOR, A., ESKIN, N., *Analysis of environmental benefits of CFB combustors via one-dimensional model*, International Journal of Thermal Sciences, N° 131, p. 301-317, 2007.

_____, *Two dimensional coal combustion modeling of CFB*, International Journal of Thermal Sciences, N° 47, p. 157-174, 2008.

GRUBOR, B., MANOVIC, V., OKA, S., *An experimental and modeling study of the contribution of coal ash to SO₂ capture in fluidized bed combustion*, Chemical engineering journal, vol. 96, p. 157-169, 2003.

HADAVAND, A., JALALI, A.A., FAMOURI, P., *An innovative bed temperature- oriented modeling and robust control of a circulating fluidized bed combustor*, Chemical Engineering Journal, p.1-12, 2008.

HAN, X., et al., *Applying eulerian and lagrangian approaches of dry desulfurization process in pulverized coal furnaces*, Energy & Fuels, vol. 15. p. 1069-1076, 2001.

HAYVANOYCH, V., PYSH'YEV, S., *Desulphurization of low rank coal with high sulfur content is the first stage of coal burning at heat electric stations*, Energy & fuels, N° 17, p. 1186-1190, 2003.

HELLAND, E., OCCELLI, R., TADRIST, L., *Numerical study of cluster formation in a gas-particle circulating fluidized bed*, Powder technology, N° 110, p. 210-221, 2000.

HOOMANS, B. P. B., et al., *Discrete particle simulation of bubble and slug formation in a two-dimensional gas-fluidised bed: A hard-sphere approach*, Chemical Engineering Science, vol. 51, N° 1, p. 99-118, 1996.

HOU, B. et al., *Dry desulphurization in a circulating fluidized bed (CFB) with chain reactions at moderate temperatures*, Energy & Fuel, N° 19, p. 73-78, 2005.

ICHIKI, K., HAYAKAWA, H., *Dynamical simulation of fluidized beds: Hydrodynamically interacting granular particles*, Physical Review E, vol. 52, N° 1, p. 658-670, Julho 1995.

JIRADILOK, V. et al., *Kinetic theory based CFD simulation of turbulent fluidization of FCC particles in a riser*, Chemical engineering Science, vol. 61, p. 5544-5559, 2006.

- YUNHAN, Z. et al., *Numerical prediction of carbon particle cluster in a circulating fluidized bed riser*, Chemical Engineering Journal, vol. 118, p. 1-10, 2006.
- YUU, S., UMEKAGE, T., JOHNO, Y., *Numerical simulation of air and particle motions in a bubbling fluidized bed of small particles*, Powder technology, N° 110, p. 158-168, 2000.
- KALKREUTH, W., et al., *Exploring the possibilities of using Brazilian subbituminous coals for blast furnace pulverized fuel injection*, Fuel, vol. 84, p. 763-772, 2005.
- KARPPANEN, E., *Advanced control of an industrial circulating fluidized bed boiler using fuzzy logic*, Department of process engineering, University of Oulu, Finland, Academic dissertation, 2000.
- KAWAGUSHI, T., TANAKA, T., TSUJI, T., *Numerical simulation of two-dimensional fluidized beds using the discrete element method (comparison between the two and three-dimensional models)*, Powder technology, N° 96, p. 129-138, 1998.
- KUNNI, D., LEVENSPIEL, O., *Fluidization engineering*, second edition Butterworth-Heinemann, London, pp. 70, 1991.
- LOEFFLER, G., HOFBAUER, H., *Does CO burn in a fluidized bed?- A detailed chemical kinetic modeling study*, Combustion and Flame, vol. 129, p.439-452, 2002.
- LOEFLER, G. et al., *Study on NO and N₂O formation and destruction mechanism in a laboratory-scale fluidized bed*, Energy & Fuels, vol. 16, p. 1024-1032, 2002.
- MIURA, K., et al., *Analysis of formation rates of sulfur containing gases during the pyrolysis of various coals*, Energy & fuel, N° 15, p. 629-636, 2001.
- NEMTSOV, D. A., ZABANIOTOU, A., *Mathematical modelling and simulation approaches of agricultural residues air gasification in a bubbling fluidized bed reactor*, , Chemical Engineering Journal doi: 10.1016/j.cej, 2008.03.023, 2008.

- NGAMPRADIT, N., PIUMSOMBOON, P., SAJJAKULNUKIT, B., *Simulation of a circulating fluidized bed combustor with shrinking core and emission models*, Science Asia, N° 30, p. 365-374, 2004.
- PERRY, S. T., et al., *Modeling Nitrogen evolution during coal pyrolysis based on a global free-radical mechanism*, Energy & fuels, N° 14, p. 1094-1102, 2000.
- PRAYUENYONG, P., *Coal biodesulfurization processes*, SONGKLANAKARIN.J. Sci. Technology, N° 3, Vol. 24, p. 493-507, 2002.
- ROBINSON, A. L., JUNKER, H., BAXTER, L. L., *Pilot-scale investigation of the influence of coal-biomass cofiring on ash deposit*, Energy & Fuel, vol. 16, p. 343-355, 2002.
- SMOOT, L.D., *A decade of combustion research*, Energy Combustion Science, vol. 23, p. 203-232, 1997.
- SCHIMIDT, A., RENZ, U., *Numerical prediction of heat transfer in fluidized beds by a kinetic theory of granular flows*, Int. J. Therm. Sci., vol. 39, p. 871-885, 2000.
- SHUYAN, W., et al., *Numerical analysis of particle clustering effects on desulphurization and NO emission in a circulating fluidized bed combustor*, Fuel, vol. 87, p. 870-877, 2008.
- SRINIVASACHAR, S., BONI, A. A., *A kinetic model for pyrite transformations in a combustion environment*, Fuel, vol. 68, p. 829-836, 1988.
- SUN, J., BATTAGLIA, F., *Hydrodynamic modeling of particle rotation for segregation in bubbling gas fluidized beds*, Chemical Engineering Science, vol. 61, p. 1470-1479, 2006.
- TAGHIPOUR, F., ELLIS, N., WONG, C., *Experimental and computational study of gas-solid fluidized bed hydrodynamics*, Chemical Engineering Science, vol. 60, p. 6857-6867, 2005.
- TSUJI, Y., KAWAGUCHI, T., TANAKA, T., *Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed*, Powder Technology, N° 77, p. 79-87, 1993.

VAN WACHEM, B.G.M., et al., *Experimental validation of lagrangian-eulerian simulations of fluidized beds*, Powder Technology, N° 116, p. 155-165, 2001.

WEN, C. YU, Y.H., *Mechanics of fluidization*, Chemical Engineering Progress Symposium Series, N° 4, Vol. 62, p. 100-111, 1966.

XU, H., SMOOT, L. D., HILL, S. C., *A reduced kinetic model for NO_x reduction by advanced reburning*, Energy & fuels, N° 12. p. 1278-1289, 1998.

XU, W. C., KUMAGAI, M., *Sulfur transformation during rapid hiropyrolysis of coal under high pressure by using a continuous free fall pyrolyzer*, Fuel, vol. 82, p. 245-254, 2003.

ZHANG, K. et al., *CFD simulation of fluidization quality in the three-dimensional fluidized bed*, Progress in Natural Science, vol. 18, p.729-733, 2008.

ZHONG,W., et al., *Flow behaviors of a large spout-fluid bed at high pressure and temperature by 3D simulation with kinetic theory of granular flow*, Powder Technology, N° 175, p. 90-103, 2007.

ZHOU, H. FLAMANT, G., GAUTHIER, D., *DEM-LES of coal combustion in a bubbling fluidized bed part I: gas particle turbulent flow structure*, Chemical engineering science, N° 59, p 4193-4203, 2004. (a)

-----, *DEM-LES of coal combustion in a bubbling fluidized bed part II: coal combustion at the particle level*, Chemical engineering science, N° 59, p 4205-4215, 2004. (b).

ZHU, H., ZHU, J., *Characterization of fluidization behavior in the bottom region of CFB risers*, Chemical Engineering Journal, vol. 141, p. 169-179, 2008.

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](#)