

Modalidade do trabalho: Relatório técnico-científico
Evento: XXIV Seminário de Iniciação Científica

CAPTURA DE POLUENTES NA QUEIMA DE CARVÃO DO TIPO ANTRACITO¹

Sandra Beatriz Neuckamp², A. Patricia Grajales Spilimbergo³.

¹ Projeto de Iniciação Científica

² Aluna do Curso de Matemática - Licenciatura, UNIJUÍ, bolsista PIBIC/UNIJUÍ, sandrabneuckamp@outlook.com

³ Professora Orientadora, Mestre em Matemática, Curso de Matemática - Licenciatura, UNIJUÍ, patspi@unijui.edu.br

INTRODUÇÃO

A disponibilidade de grandes jazidas de carvão mineral e o baixo custo do carvão vegetal tem despertado o interesse da matriz energética mundial. O Brasil também tem acompanhado esta tendência e já começam a surgir algumas pesquisas sobre a utilização desse combustível. No entanto, na literatura encontra-se que o carvão é composto por uma parcela de enxofre (S) (LITT et al., 1984), dessa forma, no resultado de sua combustão se formam substâncias poluentes do tipo SO₂ e SO₃, indicadas genericamente por SO_x. O estudo teórico para a contenção da emissão desse tipo de poluentes, das instalações onde ocorre a combustão do carvão, pode auxiliar a indústria, no momento do planejamento e construção destas uma vez que, estas substâncias têm sido consideradas responsáveis pela chuva ácida, onde, essas águas da chuva, assim como a geada, neve e neblina, ficam carregadas de ácido sulfúrico ou ácido nítrico e ao caírem na superfície, alteram a composição química do solo e das águas trazendo vários prejuízos para o meio ambiente e a saúde humana.

Uma estratégia que tem se mostrado eficiente para a contenção dos gases poluentes é a utilização de partículas de pedra calcária (CaO*) sendo queimadas com o carvão no meio reagente, além disso, pesquisas mostram que nos sistemas fluidizados por ar (quando o carvão e a dolomita se apresentam triturados) os gases sulfúricos e sulfídricos podem ser capturados, inibindo a sua emissão na atmosfera. Desse modo, pesquisas experimentais e teóricas já estabelecem que a captura do enxofre pelo cálcio é realizada pelas reações totais:

- a) no caso de gaseificadores ocorrem os processos químicos: CaCO₃* se decompõe em CaO* + CO₂ e CaO* + H₂S se decompõe em CaS* + H₂O (* - indica substância condensada);
- b) no caso de combustores ocorrem os processos químicos: CaCO₃* se decompõe em CaO* + CO₂ e CaO* + SO₂+0,5O₂ formam CaSO₄.

Para o modelamento das transformações (a) e (b) são aplicadas principalmente duas abordagens: a da termoquímica (sistemas quimicamente equilibrados) e a da cinética da captura.

Em geral, o modelo de equilíbrio químico é aplicado nas etapas iniciais das pesquisas e no anteprojeto, quando é necessário saber concretamente se existe, ou não, a possibilidade de captura efetiva do enxofre, por outro lado, os modelos de caráter cinético são aplicados em pesquisas posteriores, quando já são conhecidos os resultados do equilíbrio químico. Assim, o objetivo deste trabalho é pesquisar teoricamente os intervalos de captura efetiva dos poluentes SO_x por partículas de pedras calcárias, através de um modelo que considera o meio reagente quimicamente equilibrado, variando a taxa de injeção de água ou ar no processo de combustão.

MODELO MATEMÁTICO

Modalidade do trabalho: Relatório técnico-científico

Evento: XXIV Seminário de Iniciação Científica

O modelo Alemassov et al. (1980) está descrito detalhadamente em Spilimbergo et al. (1999) e é constituído basicamente por três tipos de equações: equação da dissociação das moléculas nos átomos; equação da conservação da quantidade de átomos nos produtos de combustão e equação de Dalton, que fornecem um volumoso sistema de equações algébricas não lineares, e para sua resolução utiliza-se o método de Newton com algumas modificações para assegurar a convergência. Devido ao surgimento de substâncias condensadas, junto ao modelo Alemassov et al. (1980), foi utilizado "método das grandes moléculas" (GM), cuja essência está em considerar cada fase condensada como um conjunto de "moléculas grandes" (SPILIMBERGO et al., 1999).

SIMULAÇÕES NUMÉRICAS

Na literatura encontra-se alguns resultados de pesquisas teóricas sobre a captura dos poluentes SO_x, para meios reagentes bastantes simples. Não levam em conta, entre outros fatores, a complexidade da composição do carvão e a presença nos produtos de combustão de outras espécies condensadas além de substâncias calcinadas.

Assim, para este trabalho o carvão utilizado foi do tipo Antracito e a sua composição foi dada em Coimbra e Queiroz (1995). Para a realização das simulações, o meio reagente considerou 73 substâncias entre gasosas

Todos os cálculos foram realizados para P = 100.000 Pa com o coeficiente de excesso do oxidante (aox) variando de 1 a 3. Ao carvão foram acrescentadas partículas de pedras calcárias (CaO*), considerando a razão molar Ca/S=1,5. Foi considerado também, que a composição da cinza consiste de 50% de óxido de alumínio e 50% de dióxido de silício (PEET e KANNAN, 1988). A Tabela 1 apresenta a composição para o carvão do tipo antracito.

Tabela 1 – Composição (% mássico) e Poder Calorífico Alto do Antracito.

%	C	H	O	S	N	Cl	Cinza	Umidade	ΔHa (kJ/kg)
Mássico	71,88	5,09	8,55	2,16	1,72	0,07	10,53	10,22	29526,49

De acordo com os dados dessa tabela, determinou-se, conforme descrito em Spilimbergo et al. (1999), a entalpia do antracito (Ic=-4439 kJ/kg) e sua fórmula condicional: [C4,3 H5,65 O1,30 S0,06 N0,11 Cl0,002 Si0,08 Al0,09]. Acrescentando ao antracito partículas de pedras calcárias (CaO*), sua entalpia foi calculada como sendo Ic = -3657,8009 kJ/kg e sua fórmula condicional foi estabelecida como: [C5,17 H5,37 O1,32S0,06 N0,11 Cl 0,002 Al0,09 Ca0,09].

DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

A variação da temperatura dos produtos de combustão em função do coeficiente de excesso do oxidante está mostrada na Figura 1. As pesquisas foram realizadas na zona assinalada, pois a captura dos poluentes SO_x por pedras calcárias ocorre para temperaturas de 1100 a 1600 K.



Modalidade do trabalho: Relatório técnico-científico
Evento: XXIV Seminário de Iniciação Científica

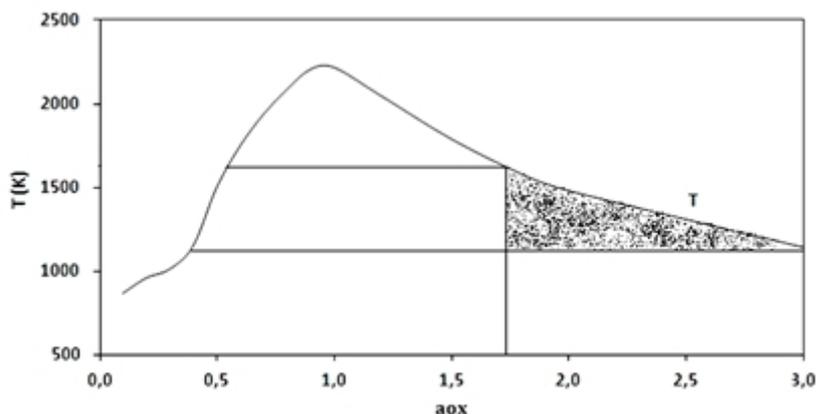


Figura 1 - Alteração da temperatura dos produtos de combustão na dependência de aox.

No combustor ocorre, logo após a zona de combustão (onde $aox(c)$ é aproximadamente igual a 1) a admissão de ar secundário ($aox(f) > 1$) e a sua influência na captura dos poluentes SO_x está mostrada na Figura 2.

Verifica-se que para $aox(f) > 2,2$ (o que corresponde a T próxima de 1480 K) o óxido de cálcio (CaO^*) reage com os produtos de combustão SO_x e transforma-se em sulfato de cálcio, confirmando assim, a captura eficaz desses poluentes, por pedras calcárias, neste tipo de instalação.

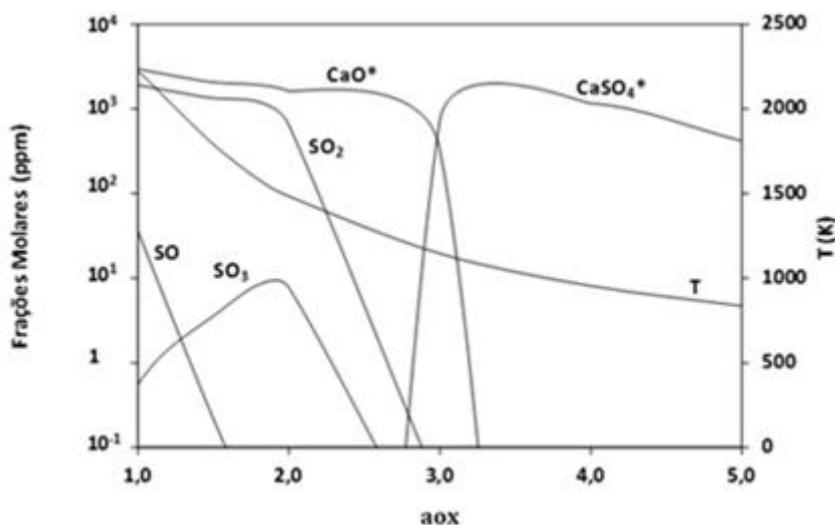


Figura 2. Influência do aumento de $aox(f)$ no processo de captura de SO_x .

As Figuras de 3 a 5 mostram a influência da injeção de água (I_{ag}) no meio reagente na captura dos poluentes SO_x por pedras calcárias em três situações: $aox(c) = 1$, $aox(c) = 1,25$ e $aox(c) = 1,5$ sem admissão de ar secundário.



Modalidade do trabalho: Relatório técnico-científico
Evento: XXIV Seminário de Iniciação Científica

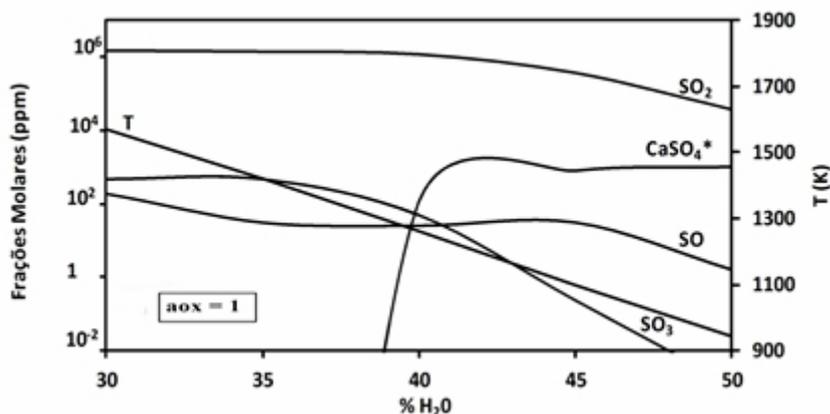


Figura 3. Influência da Iag na captura de SOx por pedras calcárias (aox(c)=1).

A Figura 3 mostra a influência da injeção de água na captura de SOx por pedras calcárias, quando $aox(c) = 1$. Pesquisaram-se taxas de injeção de água (Iag) de 10% a 50% para variar a temperatura dos produtos de combustão no intervalo de 1000 a 1600 K. Pode-se observar que das substâncias poluentes, formadas a partir do enxofre, a de maior concentração é o SO₂. Para Iag = 30%,...,42% o SO₂ não é capturado, apesar das temperaturas serem favoráveis a isto. Teoricamente a captura do SO₂ começa a ser realizada para Iag >45%, mas neste caso $T < 1100$ K, e por serem as velocidades das reações muito lentas (STOUFFER e YOON, 1989) a captura não ocorre, portanto com $aox(c) = 1$ a injeção de água impossibilita a captura do SO₂.

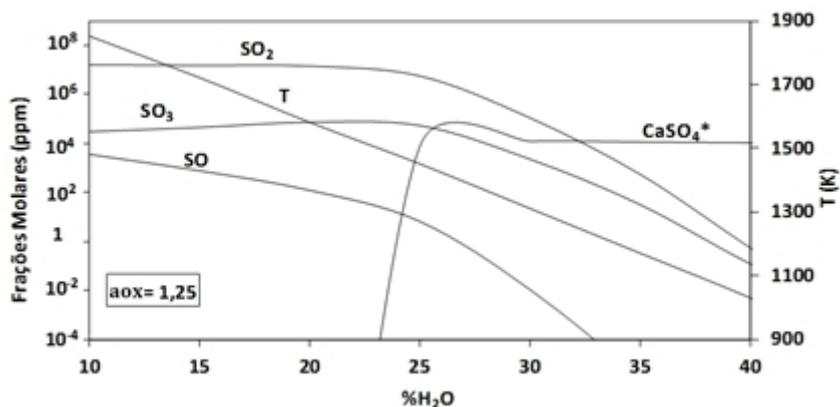


Figura 4. Influência da Iag na captura de SOx por pedras calcárias (aox(c) = 1,25).

A Figura 4 mostra a influência da Iag na captura dos poluentes SOx por pedras calcárias, quando $aox(c)=1,25$ e verifica-se que para Iag próximo de 27%, o que corresponde a T próxima a 1500 K, as substâncias SO e SO₃ já estão totalmente capturadas e começa a ocorrer a redução do SO₂.



Modalidade do trabalho: Relatório técnico-científico
Evento: XXIV Seminário de Iniciação Científica

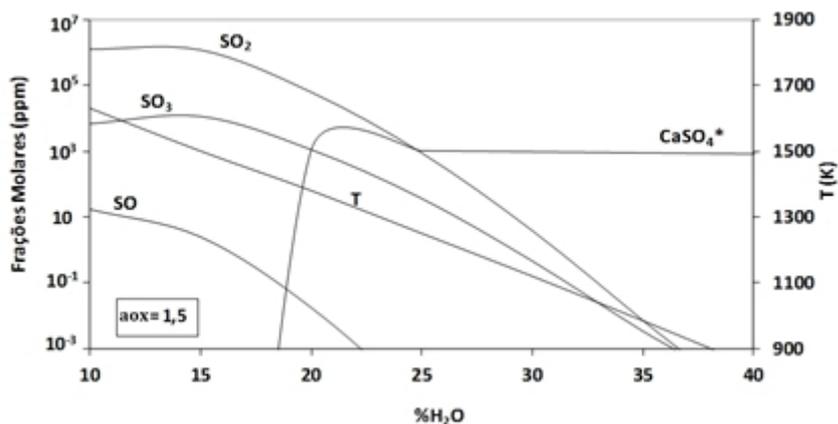


Figura 5. Influência da Iag na captura de SO_x por pedras calcárias (aox(c)=1,5)

É conhecido que o nível admissível de emissão de SO₂ no meio ambiente é em torno de 100ppm, o que corresponde a T aproximadamente 1300 K e esta temperatura se encontra na faixa da captura efetiva. Portanto quando aox(c) = 1,25 a injeção de água no meio reagente realmente contribui para a captura dos poluentes SO_x.

A Figura 5 mostra a influência da Iag na captura dos poluentes SO_x, quando aox(c) = 1,5 e verifica-se que para T aproximadamente 1350 K tem-se que a fração molar do SO₂ é de 100 ppm. Este regime operacional de uma instalação é igual ao regime aox(c) = 1,25, mas sua desvantagem é que a combustão é mais lenta e não estável, possibilitando assim o surgimento de outras substâncias poluentes.

Pela análise feita nos últimos três gráficos, pode-se concluir que havendo a injeção de água na captura dos poluentes SO_x, o regime operacional preferível da instalação é com aox(c) da ordem de 1,25.

CONCLUSÃO

Para o meio reagente "Antracito + Ar" foi pesquisada a capacidade de capturar os poluentes SO_x por pedras calcárias fluidizadas, variando a taxa de injeção de ar secundário e/ou água nos produtos de combustão. As simulações numéricas foram executadas usando um modelo de processos quimicamente equilibrados (ALEMASSOV et al., 1980). Em relação aos resultados podem-se fazer as considerações a seguir.

- A captura dos poluentes SO_x pode ser realizada para T < 1550 K, quando a fração molar das substâncias SO_x diminui de 10000 ppm até 10 ppm.
- Para aox (f) = 2,0...3,0 (sem injeção de água) no meio reagente pesquisado, o SO_x é capturado com eficácia.
- Para o caso da injeção de água, a captura de SO_x não se realiza quando aox (c) = 1, independente da taxa de injeção.
- Para aox (c) > 1 a captura do SO_x é considerável quando a taxa de injeção de água assegura a faixa de temperatura de 1100 a 1300 K.

Modalidade do trabalho: Relatório técnico-científico
Evento: XXIV Seminário de Iniciação Científica

PALAVRAS-CHAVES: Carvão. Poluentes. Combustor. Equilíbrio Químico.

REFERÊNCIAS

ALEMASSOV, V. E.; DREGALIN, A. F.; TISHIN, A. P. Teoria dos propulsores. Mashinostroenie: Moscou, 1980.

COIMBRA, C. F. M.; QUEIROZ, M. Evaluation of a dimensionalles group number to determine second-einstein temperatures in a heat capacity model for all coal ranks. Combustion and Flame, v. 101, p. 209-220, 1995.

LITT, R. D.; NACK, H.; KIM, B. C. e TUMOLO, R. Cofiring Coal With Waste Materials. In: Proceedings of 1th Annual Pittsburgh Coal Conference, Pittsburgh, Pennsylvania. 1984. p. 453-459.

PEET, W. J.; KANNAN, V. Utility boiler desingn for low volatile coals. In: Coal Combustion: Science and Tecnology of Industrial and Utility Applications, Ed Hemisphere Publishing, 623 - 632.

SPILIMBERGO, A. P.; CASTELLI, C. A.; AUTH, C. J. Simulação numérica das propriedades dos produtos de combustão de diferentes espécies de carvão. In: PROCEEDINGS OF COMPUTATIONAL METHODS IN ENGINEERING '99, 20., São Paulo, Annals... São Paulo: Escola Politécnica da USP, 1999. 1 CD-ROM.

STOUFFER M. R.; YOON, H. An investigation of cao sulfation mechanisms in boiler sorbent injection. In: AIChE Journal, v. 35, n. 8, p. 1253-1262, 1989.