

ANÁLISE EM CFD DO PROCESSO DE OXI-COMBUSTÃO DE CARVÃO PULVERIZADO EM UMA CENTRAL TERMELÉTRICA

CFD analysis of the oxy-fuel process of pulverized coal combustion in a Thermal Power Plant

ZIEMNICZAK, A.
LAZZARI, L.C.
SERAFIN, R.R.
SILVA, C. V.
BESKOW, A. B.

Recebimento: 12/05/2011 – Aceite: 01/07/2011

RESUMO: No presente trabalho, o *software* comercial Ansys CFX Europe Ltd. foi utilizado para estudar a combustão de carvão pulverizado - PC - para a caldeira de uma usina termelétrica, utilizando o processo de oxi-combustão para a queima do combustível. O objetivo principal deste trabalho é a obtenção de informações para otimização do processo a fim de avaliar as possibilidades de conversão da caldeira desta usina para operar com o processo de oxi-combustão. O carvão pulverizado CE3100 foi testado numericamente em uma usina termelétrica instalada na região sul do Brasil. Para processos de oxi-combustão, o oxidante utilizado, normalmente ar atmosférico, é substituído por uma mistura de oxigênio puro diluído em dióxido de carbono pré-aquecido. O dióxido de carbono é originado da recirculação de gases de combustão do processo de combustão enquanto o oxigênio deve ser produzido a partir do ar atmosférico numa planta criogênica. As simulações realizadas utilizam as condições reais de operação da caldeira para o carvão CE3100, que utilizam o ar atmosférico para a queima, em comparação com os processos de combustão, os quais utilizam as condições de oxi-combustão, considerando a mesma potência térmica hipotética para ambos os casos. Os resultados obtidos incluem o tempo de permanência das partículas de carvão na câmara de combustão, campos de temperatura, campos de escoamento, transferência de calor e formação de poluentes, bem como o CO e NO_x, com o objetivo de indicar possibilidades para a introdução de processos de oxi-combustão sobre esta usina termelétrica. Considerando as características

do carvão CE3100 utilizado nesta usina, com este estudo, foi possível obter dados sobre a operação de oxi-combustão para esta caldeira, indicando que é possível operar a mesma com o novo método de combustão, sendo possível sob o ponto de vista térmico, converter esta unidade. No entanto, verificou-se que, em comparação com a combustão utilizando ar atmosférico, o processo de oxi-combustão demanda diferentes condições de operação para manter estável o processo de combustão para a mesma potência térmica.

Palavras-chave: Oxi-combustão. Central Termelétrica. CFD.

ABSTRACT: In the present work the commercial software CFX © Ansys Europe Ltd. has been used to study the pulverized coal combustion – PC - into the boiler of a thermal power plant using the oxy-fuel combustion process. The main objective of this work is to obtain information for optimization process aim to identify the possibilities to convert the boiler of this power plant to oxy-fuel combustion processes. To oxy-fuel processes, the oxidant normally used, the atmospheric air, were replaced for a mixture of pure oxygen diluted in dioxide of carbon pre-heated. The carbon dioxide came from recirculation flue gas of the combustion process, while the oxygen came from the air separation in a cryogenic plant. The simulations were made using the actual burning conditions of the boiler, that use atmospheric air for burning the fuel, in comparing to combustion processes using the oxy-fuel conditions, considering the same hypothetical thermal power for both cases. The obtained results include the residence time of the coal particles into the combustion chamber, temperature fields, flow fluid mechanics, heat transfer and pollutant formation, as well as the CO and NO_x, aiming to indicate possibilities for introducing the oxy-fuel processes on this thermal power plant. Considering the characteristics of the benefited coal CE3100 used at this power plant, with this study were possible to achieve data on the oxy-fuel operation for this boiler, indicating that is thermally possible to operate this unit with this new combustion method, being possible to convert it. Such, it was verified, if compared the burn with atmospheric air, that the oxy-fuel processes demand different operation conditions to maintain stable the combustion processes to the same thermal power.

Keywords: Computational Fluid Dynamic. Thermal Power Plant. Oxy-fuel.

Introdução

Nas últimas décadas, pesquisas vêm sendo desenvolvidas a fim de buscar novas tecnologias para a produção de energia elétrica com o mínimo impacto ambiental possível, principalmente em relação às emissões de dióxido de carbono na atmosfera, um dos

principais causadores do aquecimento global. No entanto, na maior parte do mundo, o aumento da produtividade ainda está relacionado à utilização de combustíveis fósseis, como o carvão mineral e o gás natural nos processos de combustão em grandes centrais termelétricas. Dessa forma, a busca de novas tecnologias para atender a essas necessidades é de grande importância.

Nas últimas décadas, o Brasil vem atingindo significativos níveis de crescimento econômico. Sendo assim, novas alternativas energéticas vêm sendo pesquisadas a fim de manter estes níveis de crescimento econômico ou até mesmo aumentá-lo. Dessa forma, mais especificamente na região sul do Brasil, onde está disponível uma grande reserva de carvão mineral, a instalação de novas usinas térmicas que utilizam este combustível apresenta-se como uma boa alternativa para este problema. No entanto, conforme dito acima, este tipo de geração de energia acarreta altos níveis de emissão de poluentes, principalmente o dióxido de carbono na atmosfera. Assim, com o objetivo de melhorar o rendimento das instalações, os processos convencionais de queima de carvão precisam ser melhorados e, se possível, substituídos pelo uso de técnicas mais eficientes.

Na tentativa de contornar os problemas ambientais, novas técnicas de queima com ar enriquecido com oxigênio, ou até com oxigênio puro diluído em gases de combustão, vêm sendo aplicadas em processos de combustão em escala industrial. A técnica consiste em se fazer recircular parte dos gases de combustão no processo e introduzir nesse gás, que no regime permanente, é composto principalmente de CO₂ e vapor H₂O, uma quantidade de oxigênio puro necessária para garantir a queima. Assim, o nitrogênio vai sendo removido aos poucos no decorrer do processo, que se inicia de modo convencional com ar atmosférico, chegando ao extremo, no regime permanente de operação, de não mais ser necessário usar este ar, mas sim, uma mistura de oxigênio diluído em dióxido de carbono que, no final do processo, pode ser capturado e armazenado, garantindo maior eficiência na produção de eletricidade e níveis de emissão de poluentes praticamente nulos na atmosfera.

O emprego da oxi-combustão teve início nos anos cinquenta (GITMAN, 1986). Desde

então, muitos estudos e desenvolvimentos foram realizados. No início, principalmente devido à crise do petróleo e à diminuição dos custos de produção do oxigênio com avanço das técnicas criogênicas de separação do ar, as chamas enriquecidas surgiram como uma forte alternativa para melhorar a eficiência dos processos de combustão a nível industrial (SHAHANI et al., 1994, 1996). Recentemente, principalmente em função de restrições ambientais, a viabilidade econômica do processo de oxi-combustão na produção de energia em grandes centrais termelétricas a carvão se apresenta cada vez mais próxima. Um trabalho realizado por Singh et al. (2003) apresenta um estudo comparativo da viabilidade técnica e econômica da performance de uma planta de potência de 400MWe modificada num processo de “retrofitting” para operar em oxi-combustão. Duas situações são avaliadas: uma a partir da separação do CO₂ dos gases de combustão do próprio processo para seu insuflamento numa mistura com o oxigênio do ar; outra, considerando a técnica de recirculação dos gases de combustão misturando oxigênio puro. Os resultados mostram que, embora ambas sejam mais onerosas para o custo da eletricidade em cerca de 20 a 30%, a opção de recirculação dos gases de combustão e injeção de oxigênio se apresenta mais viável. No entanto, para se atingir o completo domínio da aplicação da tecnologia da oxi-combustão e obter resultado realmente satisfatório, faz-se necessário ainda uma intensa busca por maiores informações sobre o processo de queima nessas condições, principalmente para a sua aplicação na geração de vapor em centrais termelétricas. Nesse sentido, a simulação numérica aparece como uma ferramenta bastante eficaz para a realização destes estudos.

Vários estudos sobre o processo de oxi-combustão em geradores de vapor de centrais termelétricas em escala real vem sendo

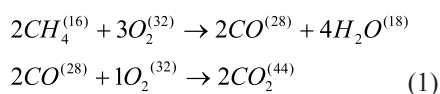
desenvolvidos nos últimos anos. Liu et al. (2005) realizaram um estudo experimental da combustão de carvão pulverizado em um incinerador de 20 kW, com diferentes concentrações de O_2/CO_2 . Para o processo de oxi-combustão com diferentes níveis de O_2 , comparado com o processo convencional que utiliza ar atmosférico, foram encontrados significativas variações da temperatura no interior da câmara de combustão, fato este que pode levar à desestabilização das chamas durante o processo de oxi-combustão. O aumento do O_2 em um total de 30% resulta num perfil semelhante à temperatura num processo estequiométrico. Os níveis de NO_x e CO são elevados na zona de combustão principalmente na região onde se concentram as partículas de carvão. Kass et al. (2008) investigaram a combustão de linhito seco e carvão mineral em uma instalação de 0,5 MWth da CEBra. O oxigênio puro (99,95% vol) foi fornecido por um tanque e misturado com o gás de combustão quente a fim de alcançar as concentrações de oxigênio similar ao ar atmosférico. Os efeitos do excesso de ar e distribuição de oxigênio entre o ar primário e secundário na maximização da concentração de CO_2 no gás de combustão, bem como a minimização de poluentes gasosos (NO , CO , SO_2), estavam entre os objetivos deste trabalho de investigação. O excesso de ar deve corresponder a uma fração molar de oxigênio de 3,24% a fim de atingir elevados níveis de CO_2 na faixa de 92,15% vol. Um aumento no excesso de ar também tem um efeito negativo sobre as emissões de NO_x e SO_x .

Assim, para o presente trabalho o software comercial Ansys CFX © Europe Ltd. foi utilizado para estudar a combustão de carvão pulverizado - PC - para a caldeira de uma usina termelétrica, utilizando o processo de oxi-combustão para a queima do combustível. O objetivo principal deste trabalho é a obtenção de informações para otimização do processo a fim de avaliar as possibilidades de

conversão da caldeira desta usina para operar com o processo de oxi-combustão. O carvão pulverizado CE3100 foi testado numericamente em uma usina termelétrica instalada na região sul do Brasil. Para processos de oxi-combustão, o oxidante utilizado, normalmente ar atmosférico, é substituído por uma mistura de oxigênio puro diluído em dióxido de carbono pré-aquecido. O dióxido de carbono é originado da recirculação de gases de combustão do processo de combustão enquanto o oxigênio deve ser produzido a partir do ar atmosférico numa planta criogênica. As simulações realizadas utilizam as condições reais de operação da caldeira para o carvão CE3100, que utilizam o ar atmosférico para a queima em comparação com os processos de combustão que utilizam as condições de oxi-combustão, considerando a mesma potência térmica hipotética para ambos os casos.

Modelagem matemática

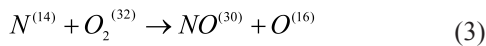
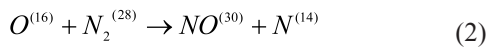
A combustão ocorre em taxas finitas de reações químicas, na qual a devolatização do carvão ocorre em dois mecanismos, produzindo metano e monóxido de carbono. Para oxidação do metano, usa-se o modelo de reações químicas WD2 (ANSYS Inc. 2004) em que, como produtos da combustão na primeira etapa de queima, formam-se monóxido de carbono e vapor d'água. Na segunda etapa de queima, o monóxido de carbono, somando-se ao que resultou da devolatização, reage com o oxigênio remanescente para formar dióxido de carbono. Essas reações podem ser vistas abaixo:



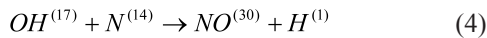
Nestas, o nitrogênio é considerado um gás inerte e a oxidação do monóxido de carbono

é modelada através da segunda reação

Quando o ar atmosférico é usado como oxidante, a formação de NOx é modelada pelo mecanismo Zeldovich, utilizando dois caminhos diferentes, *thermal-NO* e *prompt-NO*, onde o primeiro é predominante em temperaturas acima de 1800 K



Na sub ou condições quase estequiométricas, uma terceira reação é utilizada



Nesta reação, as taxas de reação química são previstas pela combinação dos modelos de *Eddy Breakup - Arrhenius*. O *NO-prompt* é formado a temperaturas inferiores a 1800 K, em que os radicais podem reagir rapidamente com o nitrogênio molecular para formar HCN. No entanto, De Soete propôs uma taxa única de reação para descrever a fonte de NO pelo mecanismo de Fennimore, usado neste trabalho, já os modelos combinados *Eddy Breakup - Arrhenius* são utilizados para prever essa taxa de reação química. Sobre o processo de devolatilização do carvão, presume-se que 50% do nitrogênio do combustível é convertido instantaneamente em HCN e o complemento não é oxidado. Neste modo, a oxidação de HCN para formar NO é modelada por *NO-fuel* e *NO-prompt*:



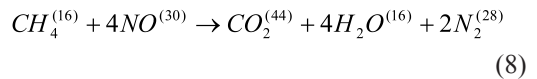
A oxidação do HCN, obtida a partir do consumo do NO, é



A oxidação do HCO é modelada por



E a re-queima dos gases de combustão do NO em CH₄:



Para o caso de oxi-combustão, foi assumido que o nitrogênio é a única fonte para a formação de NOx. Através das equações de transporte, são resolvidos os campos de velocidade, temperatura, pressão e espécies químicas. O movimento de massa do fluido é modelado usando a velocidade única, pressão, temperatura, espécies químicas e campos de turbulência (CFX INC., 2004).

Conservação de massa e de espécies químicas

Em função da pressão no processo de combustão ser próxima da pressão atmosférica, é possível considerar escoamento incompressível, sendo a variação da massa específica função apenas da temperatura. Assim, considerando o regime transiente de operação, a equação da conservação de massa pode ser expressa da seguinte forma:

$$\frac{\partial \tilde{\rho}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\tilde{\rho}_i \tilde{U}_i)}{\partial x_j} = - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho}_i (\tilde{U}_{ij} - \tilde{U}_j) - \overline{\rho_i U_j}) + S_i \quad (9)$$

onde $\tilde{U}_j = \Sigma(\tilde{\rho}_i \tilde{U}_{ij})/\bar{\rho}$, sendo $\tilde{\rho}_i$ a massa específica média em relação à massa do componente i na mistura, $\bar{\rho}$ é massa específica média dessa mistura, x é a coordenada espacial, \tilde{U} é o vetor velocidade e \tilde{U}_{ij} é a velocidade média do componente i . O termo $\bar{\rho}_i (\tilde{U}_{ij} - \tilde{U}_j)$ representa a vazão mássica rela-

tiva, e S_i é o termo fonte para o componente i , o qual inclui os efeitos das reações químicas (SILVA et al., 2007). Note que se todas as velocidades representadas na Eq. (9) forem somadas sobre todos os componentes, e o termo fonte for considerado zero, o resultado é a equação da continuidade padrão.

O fluxo de massa está relacionado ao movimento diferencial dos componentes individuais. Neste trabalho, este termo é modelado para o movimento relativo dos componentes da mistura e o efeito primário é o do gradiente de concentração. Portanto,

$$\bar{\rho}_i(\tilde{U}_{ij} - \tilde{U}_j) = \frac{\rho D_i}{\bar{\rho}} \frac{\partial \tilde{\rho}_i}{\partial x_j} \quad (10)$$

onde D_i é a difusividade mássica. A fração mássica do componente i é definida como $\tilde{Y}_i = \tilde{\rho}_i / \bar{\rho}$. Substituindo esta expressão na Eq.(10) e modelando o fluxo escalar turbulento, assumindo dissipação turbulenta segue que

$$\frac{\partial \tilde{\rho}_i \tilde{Y}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{U}_j \tilde{Y}_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\bar{\rho} D_i + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} \right) + \bar{R}_\alpha \quad (11)$$

em que μ_t é a viscosidade turbulenta, Sc_t é o número de Schimidt. A formação ou destruição de espécies químicas é obtida pelo somatório das taxas de destruição e formação da espécie em questão em todas as reações que ela se apresenta, como: $\bar{R}_\alpha = \sum_k \bar{R}_{\alpha,k}$ sendo obtidas pelo modelo combinado de Eddy-Breakup-Arrhenius, o qual leva em conta a taxa de dissipação de vórtices e os tempos turbulentos de reações químicas e a cinética química com sua taxa de reação. Pelo modelo de Arrhenius

$$\bar{R}_{\alpha,k,Chemical} = -\eta_{\alpha,k} \overline{MM}_\alpha \bar{T}^{\beta_k} A_k \Pi_\alpha \tilde{C}_\alpha^{\gamma_{\alpha,k}} \exp\left(\frac{-E_k}{\bar{R}T}\right) \quad (12)$$

para o modelo Eddy-Breakup, levando em conta chamadas difusivas, tem-se

$$\bar{R}_{\alpha,k,EBU} = -\eta_{\alpha,k} \overline{MM}_\alpha A_k \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \frac{\tilde{Y}_\alpha}{\eta_{\alpha,k} \overline{MM}_\alpha} \quad (13)$$

ou, na presença de pré-mistura, uma terceira relação é necessária para o modelo Eddy-Breakup, então dada por

$$\bar{R}_{\alpha,k,Premixing} = \eta_{\alpha,k} \overline{MM}_\alpha A_k \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \frac{\sum_p \tilde{Y}_p}{\sum_p \eta_{p,k} \overline{MM}_p} \quad (14)$$

Para o modelo combinado de E-A, o valor final de formação de espécies químicas ou taxa de destruição, que deve ser empregado no cálculo do termo fonte das equações de conservação de energia e espécies químicas, é dado pelo menor valor entre os valores obtidos com os dois métodos calculados em paralelo.

$$\bar{R}_{\alpha,k} = \min(\bar{R}_{\alpha,k,Chemical}, \bar{R}_{\alpha,k,EBU}, \bar{R}_{\alpha,k,Premixing}) \quad (15)$$

Conservação da quantidade de movimento

Para um escoamento multicomponente, a equação da conservação da quantidade de movimento é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{U}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{U}_i \tilde{U}_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_j} \delta + \frac{\partial}{\partial x_j} (\mu_{eff} \frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j}) + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial x_j \partial x_i} + S_u \quad (16)$$

onde a viscosidade efetiva é $\mu_{eff} = \mu + \mu_t$ Nessa expressão, μ é a viscosidade dinâmica da mistura e μ_t é a viscosidade turbulenta, definida como $\mu_t = C_\mu \rho k^2 / \varepsilon$, em que C_μ é uma constante empírica do modelo de turbulência $k-\varepsilon$. O termo $p' = \bar{p} - (2/3)k$ representa uma pressão modificada, onde \bar{p} é a pressão média da mistura e δ é a função

delta de Krönecker para a notação indicial. O termo S_u representa um termo fonte médio, no qual podem ser computadas as contribuições das flutuações de velocidade devido à turbulência do escoamento devido à presença de derivadas cruzadas nas médias de Reynolds, assim como a força de arrasto devido ao transporte de partículas (SILVA et al., 2007).

Modelo de turbulência $k-\omega$

As equações para energia cinética turbulenta, k , e sua frequência turbulenta, ω , são:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{U}_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \beta' \rho k \omega \quad (17)$$

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{U}_j \omega) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + \alpha \frac{\omega}{k} P_k - \beta \rho \omega^2 \quad (18)$$

em que β' , β e α são constantes empíricas do modelo de turbulência, σ_k e σ_ω são números de Prandtl de energia cinética e frequência, respectivamente, e P_k é o termo que representa produção ou destruição de energia cinética turbulenta, sendo este último dado por

$$P_k = \mu_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad (19)$$

Conservação de energia

Considerando-se o transporte de energia devido à difusão de cada espécie química, a equação de energia pode ser escrita como

$$\frac{\partial(\rho \bar{h})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{U}_j \bar{h}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{k}{c_p} \right) \frac{\partial \bar{h}}{\partial x_j} + \sum_i^{N_c} \bar{\rho} D_i \bar{h}_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \bar{h}}{\partial x_j} \right) + \bar{S}_{rad} + \bar{S}_{rea} \quad (20)$$

onde \bar{h} , e c_p representam a entalpia média e o calor específico da mistura, respectivamente. Este último é dado por

$$c_p = \sum_\alpha \tilde{Y}_\alpha c_{p,\alpha} \quad (21)$$

em que $c_{p,\alpha}$ e \tilde{Y} são o calor específico e a média da fração mássica da espécie química α , k é a condutividade térmica média da mistura, Pr_t é o número de turbulência de Prandtl e \bar{S}_{rad} representa a fonte média de energia térmica devido à transferência de calor por radiação.

O termo fonte \bar{S}_{rea} apresenta o somatório dos termos fontes médios de entalpia devido às reações químicas, e, segundo Nieckele et al. (2001) e Ansys Inc. (2004), pode ser definido da seguinte forma:

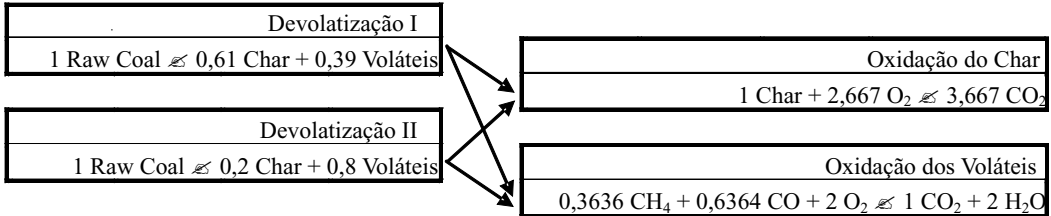
$$\bar{S}_{rea} = \sum_\alpha \left[\frac{h_\alpha^0}{M M_\alpha} + \int_{\tilde{T}_{ref,\alpha}}^{\tilde{T}} c_{p,\alpha} d\tilde{T} \right] \bar{R}_\alpha \quad (22)$$

Neste \bar{R}_α é a taxa volumétrica de formação ou destruição da espécie α , obtida com modelo de reações químicas. Nesta equação, são consideradas todos os reagentes e todos os produtos considerados nas reações de oxidação dos combustíveis. O termo h_α^0 é a entalpia molar de formação da espécie α , \tilde{T} é a temperatura de referência, e $\tilde{T}_{ref,\alpha}$ é a temperatura de referência da espécie α .

Modelo de devolatilização do carvão mineral

A devolatilização do carvão é modelada, usando o modelo de taxas de Arrhenius em dois passos (UBHAYAKAR et al., 1976, apud SILVA et al., 2007), no qual duas diferentes taxas de reação e diferentes rendimentos de devolatilização competem para produzir a pirólise do carvão bruto. A primeira reação predomina em partículas de temperatura mais baixa e tem um rendimento Y_1 inferior ao rendimento Y_2 da segunda reação que domina em temperaturas mais altas. Como resultado,

o rendimento final de devolatilização dependerá do histórico de temperaturas da partícula e aumentará com a temperatura, resultando em algum lugar entre Y_1 e Y_2 . Neste modelo, a fração mássica do carvão bruto é especificada como a fração mássica de voláteis, uma



Quadro 1 - Esquema básico das reações químicas do carvão na combustão (SILVA et al., 2007).

No momento t , presume-se que uma partícula de carvão constituída da massa de carvão bruto C_o , massa de carbono C_{ch} após ter ocorrido a devolatilização e massa das cinzas (A). As taxas constantes k_1 e k_2 de duas reações determinam a taxa global da conversão do carvão bruto:

$$\frac{dC_o}{dt} = -(k_1 + k_2)C_o \quad (23)$$

A taxa de produção de voláteis é dada por

$$\frac{dV}{dt} = (Y_1 k_1 + Y_2 k_2)C_o \quad (24)$$

e então a taxa de formação do carbono é

$$\frac{dC_{ch}}{dt} = ((1 - Y_1)k_1 + (1 - Y_2)k_2)C_o \quad (25)$$

Modelo de oxidação da superfície do carbono

A taxa de difusão do oxigênio para o interior de uma partícula de carvão é dada por $k_d(p_g - p_s)$, onde p_g é a pressão parcial do oxigênio nos gases de combustão que for-

vez que todos estes materiais podem ser convertidos para voláteis.

O Quadro 1 apresenta, de forma esquemática, os mecanismos de devolatilização do carvão e oxidação do carbono e voláteis.

mam a camada limite sobre a partícula e p_s é a pressão do oxigênio na superfície das partículas. O valor de k_d é dado por $k_d = \frac{D_{ref} R_p^{-1} (T_p - T_g (2T_{ref})^{-1})^\alpha}{\bar{p}}$, em que R_p

representa o raio da partícula, T_p é a temperatura da partícula, T_g é a temperatura média dos gases longe da partícula e p_A é a pressão atmosférica. Nessa equação, D_{ref} é a difusividade mássica do oxigênio na partícula e α é o expoente de valor 0,75. A taxa de oxidação de carbono por unidade de área na superfície da partícula é dada por $k_c p_s$. O coeficiente de taxa de reação química é dado por $k_c = A_c \exp(-T_c/T_p)$, na qual os parâmetros

A_c e T_c dependem do tipo de carvão. A taxa global de reação da partícula de carvão é dada por $(k_d^{-1} + k_c^{-1})^{-1} C_{O_2} 4\pi R_p^2 \bar{p}/p_A$ e é

controlada pelas duas taxas limites de reação química k_d e k_c (SILVA et al., 2007).

Equação da queima do carbono residual da partícula de carvão

Monson et al. (1995) propuseram um modelo global para combustão do carbono

na superfície externa da partícula, dado por

$$\frac{dm_C}{dt} = -A_{k1} \exp\left(-\frac{E_{k1}}{R_u T_p}\right) P_{O_2}^{0,5} A_p^C \quad (26)$$

Neste P_{O_2} é a pressão parcial de oxigênio, A_p^C é a área ocupada pelo carbono na superfície da partícula, A_{k1} e E_{k1} são parâmetros cinéticos determinados por Monson et al. (1995) para 4 níveis de pressão e seus valores são indicados na Tab. 1.

Tabela 1- Constantes A_{k1} e E_{k1} para a equação do consumo de carbono para 4 níveis de pressão (MONSON et al., 1995, apud COSTA, 2002).

Pressão (atm)	A_{k1} (kg / m ² s atm ^{0,5})	E_{k1} (J/kgmol)
1	17,8	60,21.10 ⁶
5	0,382	14,24.10 ⁶
10	0,227	15,90.10 ⁶
15	0,098	20,51.10 ⁶

Sabendo-se que a área da superfície da partícula ocupada pelo carbono é

$$A_p^C = \frac{A_p V_C}{V_p} \quad (27)$$

e que volume da partícula ocupada pelo carbono é dado por

$$V_C = \frac{m_C}{\rho_C} \quad (28)$$

e, ainda, que o volume total da partícula é

$$V_p = \sum \frac{m_s}{\rho_s} \quad (29)$$

onde o índice s indica água, carbono, voláteis e resíduos, a área da partícula pode ser determinada por

$$A_p = K_\varphi V_p^{2/3} / f^R \quad (30)$$

em que $K_\varphi = (36\pi)^{1/3} = 4,836976$ e $f^R = 0,6$ é o fator de rugosidade (COSTA, 2002).

Substituindo-se as Eqs. (28), (29) e (30) na Eq. (31), o resultado é

$$A_p^C = \left(K_\varphi \frac{m_C}{\rho_C}\right) / \left(\sum \frac{m_s}{\rho_s}\right)^{1/3} f^R \quad (31)$$

Multiplicando-se numerador e denominador por $\frac{f_p}{G_\Sigma}$, onde f_p é o número de partículas de carvão que entram no volume de controle por área e por segundo e G_Σ é o consumo total da massa da partícula (carvão+oxidante+pedra calcária), dado por $G_\Sigma = G_p + G_g + G_{cal}$, obtém-se

Substituindo-se a Eq. (33) pela Eq. (27), tem-se

$$A_p^C = \left(\frac{f_p}{G_\Sigma} K_\varphi \frac{m_C}{\rho_C}\right) / \left[\left(\frac{f_p}{G_\Sigma}\right)^{2/3} \left(\frac{f_p}{G_\Sigma} \sum \frac{m_s}{\rho_s}\right)^{1/3} f^R\right] \quad (32)$$

Substituindo-se a Eq. (33) pela Eq. (27), tem-se

$$\frac{dm_C}{dt} = \frac{-A_{k1} \exp\left(\frac{-E_{k1}}{RT_p}\right) P_{O_2}^{0,5} K_\varphi \left(\frac{\bar{G}_C}{\rho_C}\right)}{\left(\frac{f_p}{G_\Sigma}\right)^{2/3} \left(\sum \frac{\bar{G}_s}{\rho_s}\right)^{1/3} f^R} \quad (33)$$

Multiplicando ambos os lados da equação acima por $\frac{f_p}{G_\Sigma}$ e utilizando $W = \frac{dx}{dt}$, pode-se

escrever:

$$\frac{d\bar{G}_C}{dx} = -\frac{K_\varphi}{W} P_{O_2}^{0,5} A_{k1} \exp\left(\frac{-E_{k1}}{R_u T_p}\right) \left(\frac{f_p}{G_\Sigma}\right)^{1/3} \left(\frac{\bar{G}_C}{\rho_C}\right) / \left(\sum \frac{\bar{G}_s}{\rho_s}\right)^{1/3} f^R \quad (34)$$

Deve-se salientar que a Eq. (34) considera que o carbono reage apenas com O_2 . No entanto, sabe-se que para temperaturas mais altas (~1800 K) o carbono pode reagir também com CO_2 . Para considerar este fato, basta acrescentar mais uma reação heterogênea no

mecanismo e um segundo termo na Eq. (26), que pode ser escrita finalmente como:

$$\frac{d\bar{G}_c}{dx} = -\frac{K_w}{W} \left(\frac{f_p}{G_c}\right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{\bar{G}_c}{\rho_c}\right) \left[P_{O_2}^{0,5} A_{k1} \exp\left(\frac{-E_{k1}}{R_u T_p}\right) + P_{O_2}^{0,5} A_{k2} \exp\left(\frac{-E_{k2}}{R_u T_p}\right) \right] / \left(\sum \frac{\bar{G}_c}{\rho_c}\right)^{\frac{1}{3}} f^R \equiv f_c \quad (35)$$

em que os valores de A_{k2} e E_{k2} são dados e são $9,0 \times 10^3$ e $2,8515 \times 10^8$, respectivamente (COSTA, 2002).

Descrição da Caldeira

A caldeira em estudo faz parte de um complexo termelétrico de geração de eletricidade operando com um ciclo de vapor superaquecido. A câmara de combustão tem um formato retangular e é composta por duas linhas de queimadores, cada qual com 4 queimadores. O processo de evaporação ocorre principalmente no interior dos tubos que revestem as paredes internas da caldeira. Na região superior da caldeira, encontram-se os bancos de tubos dos superaquecedores. O segundo estágio da caldeira compreende uma curva formada por um duto retangular, o banco de tubos do economizador e o aquecedor regenerativo de ar. A partir daí, os gases de combustão passam pelo precipitador eletrostático e são direcionados até a chaminé. A Fig. 1-a apresenta a disposição geral dos trocadores de calor da caldeira.

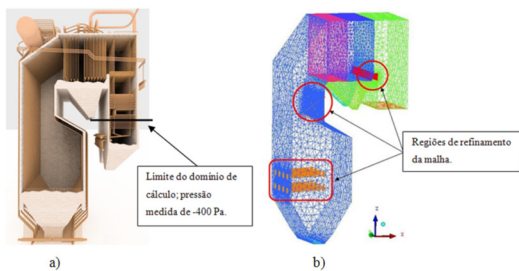


Figura 1 - (a) Disposição geral dos componentes do gerador de vapor; (b) Vista geral da malha e refinamentos.

Método Numérico

Os resultados para os campos de velocidade, temperatura, pressão e concentrações no interior da caldeira foram encontrados utilizando o software comercial Ansys CFX 11, baseado no Método de Volumes Finitos (MVF) de Patankar (1980). Foi selecionado o esquema “power-low” para avaliar os fluxos nas faces dos volumes de controle. O acoplamento entre pressão e velocidade foi resolvido pelo algoritmo SIMPLE de Patankar (1980). Fatores de relaxação foram utilizados, uma vez que as equações de conservação apresentam comportamento não-linear.

Parâmetros da Malha e Critérios de Convergência

O domínio de cálculo considerado para as simulações compreende apenas o primeiro estágio do gerador de vapor: a câmara de combustão com as duas linhas de queimadores e os trocadores de calor situados na parte superior da caldeira, considerando também a curva retangular que se estende até a região de entrada do banco de tubos do economizador. A região de entrada do segundo estágio da caldeira foi considerada como sendo a região de saída do domínio de cálculo, na qual foi prescrita uma pressão de -400 Pa. A discretização do domínio de cálculo foi realizada utilizando volumes tetraédricos e prismas nas paredes da caldeira, com o intuito de capturar os efeitos da camada limite. Devido às limitações computacionais, a malha gerada e utilizada para as simulações apresenta aproximadamente 2.800.000 elementos, com refinamentos na região da câmara de combustão e em algumas regiões da parede, conforme ilustra a Fig. 1-b.

O critério de convergência adotado foi o RMS - *Root Mean Square* dos valores residuais, e o valor adotado para todas as equações foi de 1×10^{-4} .

O tempo físico para a solução da formulação com este critério de convergência é de cerca de 10 dias. Para tal, usam-se computadores com processadores Core 2 Quad, com 16 Gb de RAM.

Condições de Contorno

As condições de contorno empregadas na solução das simulações foram extraídas de dados experimentais repassados pela usina termelétrica a partir dos dados reais de operação da caldeira. O excesso de ar utilizado foi considerado o mesmo em ambos os casos, bem como a carga térmica. A quantidade de ar que entra na caldeira é dividida em ar primário e ar secundário nas proporções de 30 % e 70 %, respectivamente. Junto ao ar primário, entra o carvão pulverizado.

Para o processo convencional de combustão de carvão pulverizado, utilizando o carvão beneficiado brasileiro CE3100, a vazão mássica de ar primário é de 4,5 kg/s e de ar secundário é de 10,71 kg/s. A vazão mássica de carvão é de 6 kg/s. O ar primário e o carvão entram na câmara de combustão a 373 K e o ar secundário entra na câmara a 550 K. O tamanho das partículas de carvão pulverizado foi modelado por um modelo probabilístico de distribuição limitado entre 50 μm e 200 μm .

Já no processo de Oxi-combustão, o oxidante é uma mistura de 30% de oxigênio, 10% de umidade e 60% de gás carbônico proveniente dos gases de combustão, o qual permanece recirculando no interior do gerador de vapor. A vazão mássica de ar primário e secundário é de 2,99 kg/s e 6,98 kg/s, respectivamente. A vazão mássica de carvão pulverizado é de 1,04 kg/s. Assim

como no primeiro caso, o ar primário e o carvão entram na câmara de combustão a 373 K e o ar secundário entra na câmara a 550 K. O tamanho das partículas é também limitado entre 50 μm e 200 μm .

A Tab. 2 apresenta a composição química do carvão beneficiado brasileiro CE3100 em base seca e em base úmida, considerando 16,47 % de umidade.

Tabela 2 – Composição química do carvão beneficiado brasileiro CE3100 em base seca e em base úmida.

Carvão beneficiado CE3100		
Espécies químicas	Base seca	Base úmida
Carbono	33,21 %	27,74 %
Cinzas	54,78 %	45,76 %
Oxigênio	7,92 %	6,62 %
Hidrogênio	2,34 %	1,95 %
Enxofre	1,14 %	0,95 %
Nitrogênio	0,61 %	0,51 %
Umidade	0,00 %	16,47 %

Em ambos os casos, a condição de contorno na saída do gerador de vapor foi prescrita como pressão estática, sendo seu valor de -400 Pa. Da mesma forma, foi prescrita uma temperatura de 550 K para as paredes do gerador de vapor, que é a temperatura de saturação do vapor d'água no interior dos tubos. A emissividade das paredes foi considerada como 0,6 e todas as outras regiões como as regiões de entrada e de saída, foram consideradas corpos negros, ou seja, que não apresentam emissividade. A metodologia empregada no presente trabalho foi testada e validada em Silva et al. (2010). Neste trabalho, o enxofre presente no carvão foi considerado inerte ao processo de combustão. Na sequência do projeto, será implementado um modelo de reações químicas para esta espécie química na modelagem computacional.

Resultados

A seguir, são apresentados e analisados os resultados das simulações realizadas para ambos os processos de combustão: processo convencional e oxi-combustão. As Figs. 3 a 5 apresentam os resultados para campos de temperaturas, concentrações de espécies químicas de CO e O₂ sobre um plano vertical da caldeira para o processo convencional e de oxi-combustão. O plano apresentado encontra-se entre os queimadores.

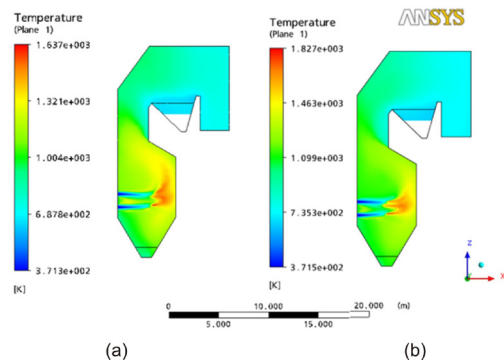


Figura 2 - Campo de temperaturas sobre um plano transversal vertical na caldeira : (a) Combustão convencional; (b) Oxi-combustão.

É possível verificar na Fig. 2 que as temperaturas, neste plano da caldeira, não são semelhantes nos dois processos, porém são fisicamente coerentes. Pode-se observar a predominância das temperaturas acima de 1800 K na região da chama representada na entrada dos queimadores para o processo de oxi-combustão.

A Fig. 3, a seguir, mostra concentração de NO_x nos gases da combustão sobre o mesmo plano vertical da caldeira. Para o processo de oxi-combustão, a produção de NO_x é governada pelo mecanismo de Fenimore, usado para prever a formação de *NO-prompt* e *NO-fuel*. Sua produção deve-se basicamente ao fato de que as temperaturas da chama alcançam valores da ordem de

1800K (Fig. 2), conforme Lacava 2000. Assim, para as condições de operação utilizadas neste trabalho, existe uma melhora no processo usando oxi-combustão, porém aumenta para as proporções aplicadas, os níveis de produção de NO_x. Considera-se aqui que 50% do nitrogênio do combustível instantaneamente se transforma em HCN durante a devolatização, abastecendo as reações globais do mecanismo de Fenimore. O restante do nitrogênio fica inerte no processo. Será preciso realizar maiores estudos sobre as condições de operação para o processo de oxi-combustão, principalmente em relação à magnitude das temperaturas de insuflamento do oxidante e a relação oxidante combustível, o que implica na alteração das vazões de entrada do ar primário e secundário.

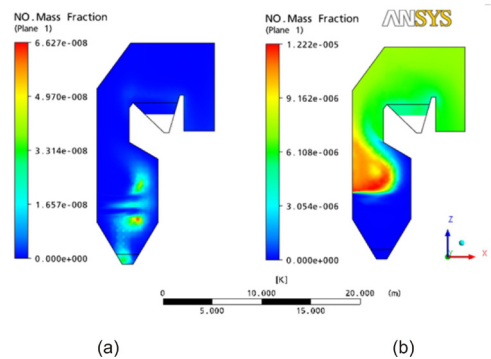


Figura 3 - Campos de concentração de NO_x sobre um plano transversal vertical na caldeira: (a) Combustão convencional; (b) Oxi-combustão.

Na Fig. 4, a seguir, é possível notar que a concentração de CO nos jatos de entrada dos queimadores é quase nula em praticamente toda sua extensão e aumenta até seu valor máximo próximo do final do jato (chama, região de temperatura mais elevadas), resultado do preaquecimento e posterior devolatização do carvão no processo. Nota-se, para o processo de oxi-combustão que, na região logo abaixo dos jatos, e também imediatamente acima deles, existe uma grande quantidade desta espécie química, também produto da devolatização do carvão, mas intensificada pela combustão parcial do metano, também

devolatilizado no processo. Entretanto, para ambos os casos, o CO recircula dentro da câmara de combustão, passando novamente através da região rica em oxigênio (Fig.5), sendo então praticamente todo queimado no processo.

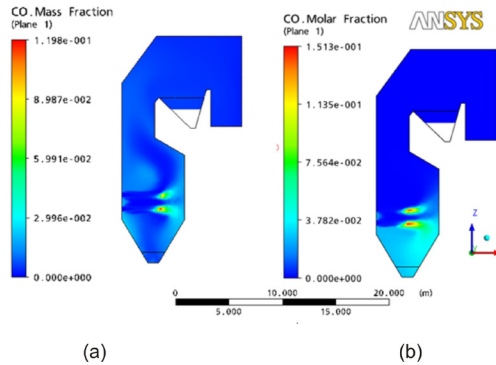


Figura 4 - Campos de concentração de monóxido de carbono sobre um plano transversal vertical na caldeira: (a) Combustão convencional; (b) Oxi-combustão.

A Fig. 5 mostra a comparação dos campos de concentração de oxigênio para o processo convencional do carvão pulverizado CE3100 e o processo de oxi-combustão, sobre o mesmo plano transversal vertical na caldeira. Observa-se que, para o processo de oxi-combustão, tem-se uma quantidade de oxigênio sendo injetada no oxidante de 30% de O_2 , enquanto no processo convencional, a quantidade de oxigênio injetada junto ao oxidante é de 23% de O_2 , surgindo assim, o processo de oxi-combustão com uma chama mais rica em oxigênio. Observa-se que a maior concentração de oxigênio encontra-se na região de entrada dos jatos das chamas para ambos os casos. Também se observa que o oxigênio é consumido mais intensamente no processo convencional de combustão do que no processo de oxi-combustão, resultando assim, numa menor concentração de oxigênio nos gases da combustão. O fato de se ter 30% da quantidade de oxigênio no processo de oxi-combustão melhora a eficiência do processo e gera níveis mais elevados

de temperatura, como verificado na Fig. 2, anteriormente.

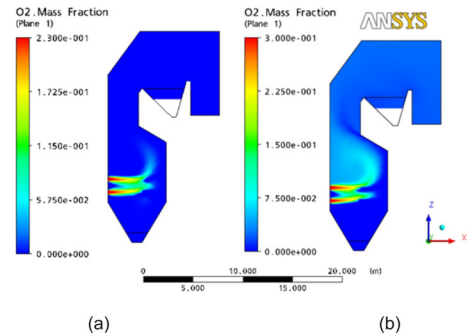


Figura 5 - Campos de concentração de oxigênio sobre um plano transversal vertical na caldeira.: (a) Combustão convencional; (b) Oxi-combustão.

A Tab. 3, a seguir, mostra os dados globais das frações mássicas encontrados na saída da caldeira para um processo com oxi-combustão e o processo convencional de combustão de carvão beneficiado, tipo CE3100. Pode-se observar que, para algumas espécies químicas, as frações mássicas apresentaram grande variação entre os dois processos, por exemplo, a fração mássica de CO, que diminuiu na oxi-combustão pelo aumento de concentração de oxigênio no reagente, e o NOx que, por outro lado, sofreu um relativo aumento, como era esperado em função das condições de operação em oxi-combustão.

Tabela 3 - Dados globais na região de saída da caldeira: Processo convencional e Oxi-combustão

	Combustão convencional do carvão pulverizado CE 3100		Processo de Oxi-Combustão do carvão CE 3100	
	Valor absoluto	Relativo	Valor absoluto	Relativo
Temperatura	712.8 K	-	715.3 K	-
CO*	0.0033 [kg/kg]	0.33 %	1.32x10 ⁻⁶ [kg/kg]	1.32 ppm
CO ₂ *	0.2571 [kg/kg]	25.7 %	0.8315 [kg/kg]	83.15 %
CH ₄ *	0.0016 [kg/kg]	0.15 %	3.07x10 ⁻⁸ [kg/kg]	0.0307 ppm
H ₂ O*	0.0591 [kg/kg]	5.9 %	0.1461 [kg/kg]	14.6 %

N_2^*	0.6804 [kg/kg]	68 %	3×10^{-4} [kg/kg]	0.03%
NOx^*	1.12×10^{-9} [kg/kg]	1.12×10^{-3} ppm	6.66×10^{-6} [kg/kg]	6.66 ppm
O_2^*	~0 [kg/kg]	~0 %	0.0217 [kg/kg]	2.17 %
HCN^*	3.4×10^{-4} [kg/kg]	0.034 %	3×10^{-4} [kg/kg]	0.030 %
HCO^*	4.47×10^{-9} [kg/kg]	4.47×10^{-3} ppm	1.62×10^{-11} [kg/kg]	1.1×10^{-5} ppm
Total	1 [kg/kg]	100 %	1 [kg/kg]	100 %

A ausência de NO no processo convencional deve-se ao fato de que, a partir das reações de Fenimore, uma fração de CH_4 reage com o NO para formar CO_2 , H_2O e N_2 . Assim, para o processo convencional, a quantidade de CH_4 em relação à oxidação é muito elevada, fazendo com que a formação de NO torne-se baixa, isto é, fruto da ineficiência da combustão no caso convencional de combustão.

Conclusões

O processo de oxidação pode ser utilizado como uma boa alternativa para reduzir as emissões de poluentes na atmosfera, atenuando o processo de aquecimento global do planeta, pois permite a captura e o sequestro do carbono, melhorando o aproveitamento das nossas reservas de disponibilidade, intensificando o uso de carvão mineral na matriz energética do Brasil. No entanto, é necessário realizar, além de uma análise econômica, maiores testes com variantes do processo em oxidação, a fim de verificar a viabilidade da implementação desse tipo de queima.

AUTORES

Aline Ziemniczak – Acadêmica de Engenharia Industrial Mecânica pela Universidade Regional do Alto Uruguai e das Missões - URI - Campus de Erechim, atualmente é bolsista pesquisadora pelo CNPq no projeto de Modelagem dos Processos de Combustão na própria universidade. E-mail: aline.zz@hotmail.com

Luis Carlos Lazzari – Acadêmico de Engenharia Industrial Mecânica pela Universidade Regional do Alto Uruguai e das Missões - URI - Campus de Erechim, atualmente é bolsista pesquisador pelo CNPq no projeto de Modelagem dos Processos de Combustão na própria universidade.

Rômulo Renan Serafin – Acadêmico de Engenharia Industrial Mecânica pela Universidade Regional do Alto Uruguai e das Missões - URI - Campus de Erechim, atualmente é bolsista pesquisador pelo programa PIIC - URI no projeto de Modelagem dos Processos de Combustão na própria universidade.

Cristiano Vitorino da Silva – Doutor em Engenharia Mecânica pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, Brasil, atualmente é professor e coordenador do Curso de Engenharia Mecânica da Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões – URI – Campus de Erechim.

Arthur Bortolin Beskow - Mestre em Engenharia Mecânica pela Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, PUCRS, Brasil. Atualmente é professor do Curso de Engenharia Mecânica da Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões - URI - Campus de Erechim.

REFERÊNCIAS

- ANSYS Inc. “**User’s guide - CFX Solver Theory**”. 2004
- COSTA, V.J. **Modelo matemático para a combustão de carvão pulverizado e sua interação com a água**. Dissertação de Doutorado – Universidade Federal de Santa Catarina. Florianópolis, 2002.
- GITMAN, G., PYRETRON., **Variable Gas/Oxygen/Air Combustion System**. In: Proceedings of Industrial Combustion Technology Symposium, Chicago, Il, pp. 171-178, 1986.
- KASS H, TAPPE S, KRAUTZ HJ., **The combustion of dry lignite under oxy-fuel process conditions in a 0.5 MWth test plant**. Phys Proc, 2008.
- LACAVA, P.T., **Investigação experimental do enriquecimento do ar na incineração de resíduos aquosos**. Doctoral Thesys, ITA - Instituto Tecnológico da Aeronautica, Brazil, 2000.
- LIU H, ZAILANI R, GIBBS B, M., **Comparisons of pulverized coal combustion in air and in mixtures of O₂-CO₂**. Fuel; Vol. 84, pp 833-840, 2005.
- MONSON, C. R., GERMANE, G. J., BLACKHAM, A. U. e SMOOT, L. D. **Char oxidation at elevated pressures**. Combustion and Flame, 100, 1995.
- NIECKELE, A. O., NACCACHE, M. F., GOMES, M. S. P., CARNEIRO, J. E. e SERFATY, R. **Evaluation of models for combustion processes in a cylindrical furnace**. ASME-IMECE, International Conference of Mechanical Engineering, New York, 2001.
- PATANKAR, S.V., **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. Hemisphere, Washington, DC, 1980.
- SHAHANI, G.H.; BUCCI, D.; DE VINCENTIS, D.; GOFF, S.; MUCHER, M.B., **Intensify Waste Combustion With Oxygen Enrichment**, Air Products Publication, Reprinted from Chemical Engineering, by McGraw-Hill, 1994.
- SHAHANI, G.H.; GUNARDSON, H.H.; EASTERBROOK, N.C., **Consider Oxygen for Hydrocarbon Oxidations**, Chemical Engineering Progress, Vol. 92(11), pp 66-71, 1996.
- SILVA, C. V., FRANÇA, F. H. R. AND VIELMO, H. A., **Analysis of the turbulent, non-premixed combustion of natural gas in a cylindrical chamber with and without thermal radiation**. Comb. Sci. and Tech., Vol. 179, pp. 1605–1630, 2007.
- SILVA, C. V., INDRUSIAK, M. L. S. AND BESKOW, A., **CFD analysis of the pulverized coal combustion processes in a 160 MWe tangentially-fired-boiler of a thermal power plant**. Journal of the Braz. Soc. of Mech. Sci. & Eng., Vol.32, pp. 427-436, 2010.
- SINGH, D., CROISSET, E., DOUGLAS, P.L., DOUGLAS, M. A., **Techno-economic study of CO₂ capture from an existing coal-fired power plant: MEA scrubbing vs. O₂/CO₂ recycle combustion**. Energy Conversion and Management, Vol. 44, pp. 3073- 3091, 2003.
- UBHAYAKAR, S. W., STICKLER, D. B., ROSENBERG JR., C. W. AND GANNON, R. E., **Rapid Devolatilization of Pulverized Coal in Hot Combustion Gases**. Symp. Int. on Combustion, The Combustion Institute, Vol. 16, pp. 427-436, 1976.

