

Aplicação do Modelo de Equilíbrio Químico para a Captura de Poluentes por Pedras Calcárias em Carvão do tipo Antracito

Sandra Neuckamp – Bolsista PIBIC/UNIJUI; Patricia Spilimbergo – Prof^a. Orientadora

UNIJUI – Universidade do Noroeste do Estado do Rio Grande do Sul

DCEEng – Departamento de Ciências Exatas e Engenharias

Introdução

- O uso do carvão aumenta, a cada ano, na matriz energética mundial e esta tendência tem se revelado também no setor energético nacional.
- São aplicados principalmente dois tipos de equipamentos: combustores e gaseificadores, sendo os mais eficazes (do ponto de vista da diminuição de poluentes) os reatores com leito fluidizado, onde existe a possibilidade de reduzir essencialmente a emissão de poluentes.
- Para captura desses gases poluentes é utilizada a dolomita com uma grande parcela de substâncias calcinadas como CaCO_3^* ou CaO^* (*- indica substância condensada).
- Pesquisas experimentais mostram que nos sistemas fluidizados por ar (quando o carvão e a dolomita se apresentam triturados) os gases sulfúricos e sulfídricos podem ser capturados e dessa maneira diminuir os impactos ambientais causados pelos mesmos.

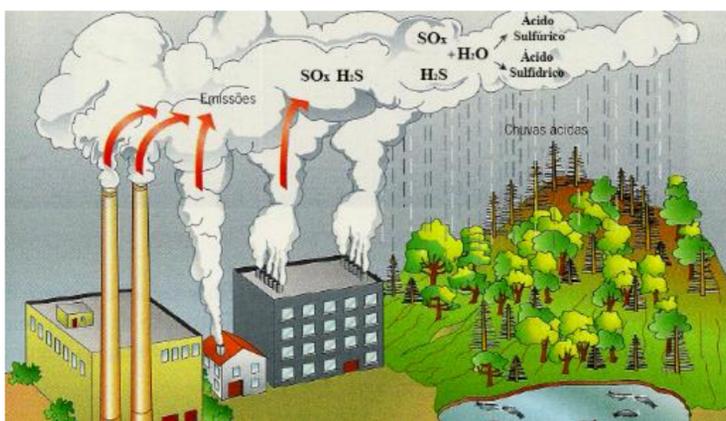


Figura 1 – Esquema da formação de chuva ácida

Objetivo

- O presente trabalho objetiva pesquisar a possibilidade “termoquímica” de remoção dos gases sulfúricos e sulfídricos por pedras calcárias em meios reagentes para o carvão do tipo antracito em condições adiabáticas.

Metodologia

- Neste trabalho é utilizado um modelo de equilíbrio químico (Alemassov et al., 1980), que é constituído basicamente por três tipos de equações:

- 1) A equação da dissociação das moléculas nos átomos;
- 2) A equação da conservação da quantidade de átomos nos produtos de combustão;
- 3) A equação de Dalton.

- As relações (1)-(3) fornecem um volumoso sistema de equações algébricas não lineares, e para sua resolução é utilizado o método de Newton.

- Devido ao surgimento de substâncias condensadas, junto ao modelo de equilíbrio químico foi utilizado o “método das grandes moléculas” (GM), cuja à essência está em considerar cada fase condensada como um conjunto de “moléculas grandes” (Spilimbergo et al., 1999).

Resultados e Discussões

- Na literatura encontra-se alguns resultados de pesquisas teóricas sobre a captura dos poluentes SO_x , para meios reagentes bastantes simples. No entanto, 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 e condensadas.

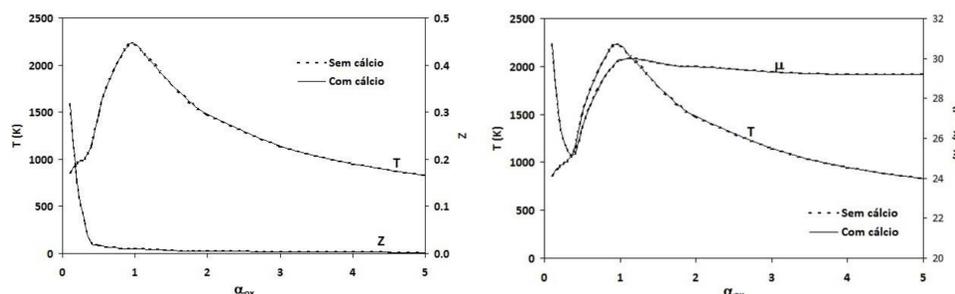
- Todos os cálculos foram realizados para $P = 1 \text{ atm}$ com o coeficiente de excesso do oxidante variando de 0,1 a 5,0. Ao carvão foram acrescentadas partículas de pedras calcárias (CaO^*), considerando a razão molar $\text{Ca/S} = 1,5$.

- A Tab. 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	Umidade	Cinza	ΔHa (Btu/lb)
71,88	5,09	8,55	2,16	1,72	0,07	10,22	10,53	12,681

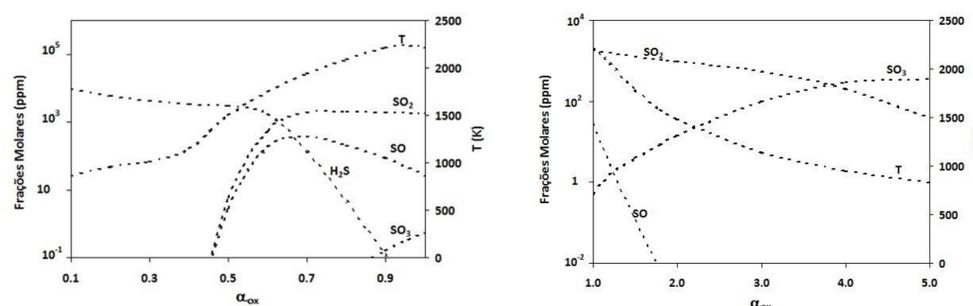
- As simulações numéricas para o antracito foram realizadas para dois meios reagentes: sem e com acréscimo de CaO^* .



Figuras 2 e 3. Distribuições T e Z e Distribuições T e Massa Molecular

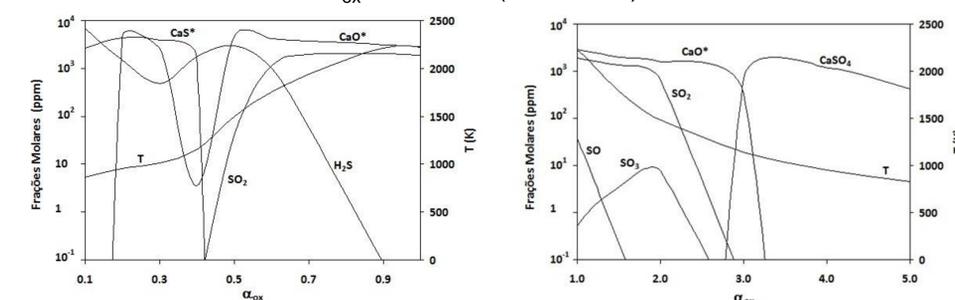
- Na Fig. 2 estão apresentadas as distribuições T e Z (Z - fração mássica total de substâncias condensadas) e na Fig. 3 as distribuições da Temperatura e Massa Molecular, variando o coeficiente de excesso do oxidante (α_{ox}) no intervalo de 0,1 a 5,0.

- É evidente que com o acréscimo de CaO^* ao antracito não houve alterações nas distribuições.



Figuras 4 e 5. Evolução das concentrações do H_2S e SO_x em função de α_{ox}

- Nas Fig. 4 e 5 são apresentadas as concentrações de substâncias poluentes como os gases sulfúricos e também H_2S , em função de o coeficiente de excesso do oxidante, no intervalo $\alpha_{\text{ox}} = 0,1 \dots 5,0$ (sem CaO^*).



Figuras 6 e 7. Alteração das substâncias envolvidas na captura dos poluentes.

- Nas Fig. 6 e 7 são apresentadas as alterações das substâncias sulfúricas e H_2S em função de α_{ox} com presença de CaO^* .

Conclusão

Assim, pode-se fazer as seguintes constatações:

- para $\alpha_{\text{ox}} < 1$ a remoção do enxofre é realizada no intervalo $\alpha_{\text{ox}} = 0,1 \dots 0,5$, por sua transferência do H_2S para a substância condensada CaS^* , quando a temperatura altera-se de 1000 até 1500K;

- para $\alpha_{\text{ox}} > 1$ a captura do SO_x ocorre para $\alpha_{\text{ox}} = 2,2 \dots 5,0$ com a passagem do enxofre do SO_x para CaSO_4^* , que corresponde ao intervalo de temperatura $T = 1500 \dots 1000\text{K}$. As principais substâncias poluentes com enxofre são: H_2S ($0,1 < \alpha_{\text{ox}} < 0,6 \dots 0,7$), SO_2 ($0,6 \dots 0,7 < \alpha_{\text{ox}} < 3,3$) e também SO_3 ($\alpha_{\text{ox}} > 3,5$).

- para $\alpha_{\text{ox}} > 3,5$ o nível das temperaturas dos produtos de combustão é baixo ($T < 1000\text{K}$) e as reações químicas são lentas. Neste caso o modelo “termoquímico” (equilíbrio químico) não é correto e do ponto de vista da prática é necessário aplicar modelos cinéticos.

Referencial

- ALEMASOV, V. E.; DREGALIN, A. F.; TISHIN, A. P. **Propriedades termodinâmicas e termofísicas dos produtos de combustão**. Moscou: VINITI, 1980. v. 1.

- 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.

- SPILIMBERGO, A. P.; KRIOUKOV, V. e GABBI, R. “Carvão+Pedra Calcária”: Aplicação do Modelo de Equilíbrio Químico na Determinação das Características dos Produtos de Combustão”. In: *Proceedings do DINCON 2011*, Águas de Lindóia, CD-ROOM, 2011.