



Evento	Salão UFRGS 2015: SIC - XXVII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2015
Local	Porto Alegre - RS
Título	Aplicação do Modelo de Equilíbrio Químico para a Captura de Poluentes por Pedras Calcárias em Carvão do tipo Antracito
Autor	SANDRA BEATRIZ NEUCKAMP
Orientador	ÂNGELA PATRICIA GRAJALES SPILIMBERGO
Instituição	Universidade Regional do Noroeste do Estado do RGS - UNIJUI

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

Sandra B. Neuckamp; A. Patricia Spilimbergo
Universidade Regional do Noroeste do Estado do Rio Grande do Sul - UNIJUÍ

Introdução

O uso do carvão aumenta, a cada ano, na matriz energética mundial e esta tendência tem se revelado no setor energético nacional, onde 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 (CaCO_3 ou CaO) e 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 diminuindo os impactos ambientais causados pelos mesmos. Assim, o objetivo desse trabalho é pesquisar a possibilidade “termoquímica” de remoção dos gases sulfúricos e sulfídricos por pedras calcárias nos meios reagentes quando $\alpha_{\text{ox}} < 1$ e $\alpha_{\text{ox}} > 1$, 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”.

Considerações Finais

O modelo de equilíbrio químico foi aplicado para prever as zonas de captura dos poluentes derivados do enxofre (H_2S , SO_x) em um sistema reagente complexo e em condições de gaseificadores ($\alpha_{\text{ox}} < 1$) e combustores ($\alpha_{\text{ox}} > 1$). Foi simulado o meio reagente: “antracito + CaO^* ” com $P = 10^5$ Pa, variando α_{ox} no intervalo de 0,1 até 5,0, considerando a razão molar $\text{Ca/S} = 1,5$ e 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 é alterada 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 ($\alpha_{\text{ox}} > 3,5$). Mas 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.

Referências

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