**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA DE ENGENHARIA DE SÃO CARLOS**

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA COMBUSTÃO EM LEITO FLUIDIZADO
DE CARVÃO MINERAL COM ALTO TEOR DE CINZAS COM DESSULFURAÇÃO
POR CALCÁRIO**

Anderson Antonio Ubices de Moraes

São Carlos

2011

Anderson Antonio Ubices de Moraes

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA COMBUSTÃO EM LEITO FLUIDIZADO
DE CARVÃO MINERAL COM ALTO TEOR DE CINZAS COM
DESSULFURAÇÃO POR CALCÁRIO**

Tese apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Engenharia Mecânica.

Área de concentração: Térmicas e Fluidos

Orientador: Prof. Dr. Fernando Eduardo Milioli

Este exemplar trata-se da
VERSÃO CORRIGIDA. A versão
original encontra-se disponível junto
ao departamento de Engenharia
Mecânica da EESC-SP

São Carlos

2011

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica preparada pela Seção de Tratamento
da Informação do Serviço de Biblioteca – EESC/USP

M827m Moraes, Anderson Antonio Ubices de
Modelagem e simulação da combustão em leito fluidizado
de carvão mineral com alto teor de cinzas com
dessulfuração por calcário / Anderson Antonio Ubices de
Moraes ; orientador Fernando Eduardo Milioli. -- São
Carlos, 2011.

Tese (Doutorado-Programa de Pós-Graduação em
Engenharia de Mecânica. Área de Concentração em Térmica
e Fluidos) -- Escola de Engenharia de São Carlos da
Universidade de São Paulo, 2011.

1. Fluidização. 2. Modelagem fenomenológica.
3. Combustão. 4. Carvão. 5. Calcário. I. Título.

FOLHA DE JULGAMENTO

Candidato(a): Engenheiro ANDERSON ANTONIO UBICES DE MORAES.

Tese defendida e julgada em 25/04/2011 perante a Comissão Julgadora:

Prof. Dr. **FERNANDO EDUARDO MILIOLI - (Orientador)**
(Escola de Engenharia de São Carlos/USP)

Aprovado

Prof. Dr. **JOSMAR DAVILSON PAGLIUSO**
(Escola de Engenharia de São Carlos/USP)

Aprovado

Prof. Dr. **HELIO APARECIDO NAVARRO**
(Escola de Engenharia de São Carlos/USP)

aprovado

Prof. Titular **FERNANDO DE LIMA CAMARGO**
(Escola de Engenharia de Piracicaba/EEP)

APROVADO

Dr. **LOURIVAL JORGE MENDES NETO**
(Vale Soluções em Energia/VSE)

Aprovado

Prof. Associado **MARCELO AREIAS TRINDADE**
Coordenador do Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Mecânica

Prof. Associado **PAULO CÉSAR LIMA SEGANTINE**
Presidente da Comissão da Pós-Graduação da EESC

Dedico este trabalho a Deus meu criador, a quem sou eternamente grato, e a toda minha família, que sempre me apoiou nos momentos mais difíceis. E em especial, ao meu irmão Emerson Marciel Ubices de Moraes (*in memoriam*).

Agradecimentos.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Fernando Eduardo Milioli, pela sua orientação, apoio, atenção e estímulo durante a realização deste trabalho. Meu sincero agradecimento pela credibilidade depositada em mim, por seus aconselhamentos e pela parceria na realização desta tese.

Aos professores doutores Antônio Moreira dos Santos, Geraldo Lombardi, Gherhardt Ribatski, Hélio Aparecido Navarro, Ivonete Ávila, Josmar Davilson Pagliuso, Oscar Mauricio Hernandez Rodriguez, Paula Cristina Garcia Manoel Crnkovic, Paulo Seleglim Júnior e Sérgio Rodrigues Fontes pelo apoio, ensinamentos e colaboração.

Aos colegas de trabalho no NETeF Analice Brandi, Christian Milioli, Cristiano Tibiriçá, Daniela Mortari, Edmilson de Souza, Ernesto Becker Junior, Eugênio da Silva, Evelise Corbalan, Fábio Toshio, Fernando Mendes, Francismara Cabral, Franciane Motta, Francisco Nascimento, Grazieli Carosio, Gustavo R. de Souza, Henrique Felcar, Iara Rodriguez, Jaqueline D. da Silva, Jonas Ansoni, Luiz Enrique Vidal, Marcus Vinicius da Silva e Renata Haeda pelos ensinamento de vida, conveniência, amizade e apoio durante toda esta jornada.

Aos funcionários do NETeF Hélio Donisete Trebi, Jorge Nicolau, José Bogni, José Francisco Torres, Roberto Lourenço, Roberto Prata Vieira, Theodemiro Fernando Luchesi pela amizade, apoio e suporte para desenvolvimento do trabalho empírico e computacional.

Ao grande e estimado amigo Sergio Lucas Ferreira pelo companheirismo, apoio e pelos diversos aconselhamentos.

Ao amigo Julio Edgar Lindo Samaniego pela amizade, garra e determinação na longa caminhada dos testes empíricos

A amiga Juliana Perandre pelo apoio, amizade e ensinamentos de vida.

Ao amigo Eduardo Fávero Pacheco da Luz pelas suas valiosas observações, sugestões e ajuda no desenvolvimento e modificações do programa de simulação.

Aos funcionários da secretaria de graduação e pós-graduação da engenharia mecânica da USP de São Carlos pela colaboração e apoio para realização deste trabalho

Aos amigos das repúblicas Mão de Onze e Paratudo pelo longo tempo de amizade, companheirismo e hospitalidade.

À Escola de Engenharia de São Carlos pelas facilidades oferecidas.

À Fundação de Amparo e Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pela bolsa de estudos concedida e apoio financeiro para desenvolvimento de todo trabalho (04/15769-9)

E a todos os demais que de uma forma ou outra colaboraram com a execução desse trabalho.

RESUMO

MORAES, A. A. U. (2011). **Modelagem e simulação da combustão de carvão mineral com alto teor de cinzas com dessulfuração por calcário**. 254 f. Tese (Doutorado), Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2011.

A geração de energia em larga escala a partir da combustão de carvões minerais impõe pesados ônus ao meio ambiente devido às emissões de poluentes. O processo de combustão em leito fluidizado destaca-se neste contexto, permitindo reduções de emissões de gases SO_x e NO_x acima de 90%. O projeto, otimização e escalonamento de reatores de leito fluidizado são realizados de forma quase completamente empírica, através de desenvolvimentos em plantas de demonstração de escalas reduzidas. Os custos e tempos de implementação envolvidos são elevadíssimos, tornando ferramentas teóricas de apoio altamente desejáveis. Neste trabalho, desenvolve-se a modelagem e simulação da combustão em leito fluidizado atmosférico borbulhante de carvão mineral com altos teores de cinzas e enxofre com dessulfuração por calcário, através de uma abordagem fenomenológica. Comparações das predições do modelo são realizadas com dados experimentais gerados na planta piloto do NETeF, e estudos paramétricos são realizados para avaliação das performances do reator. As comparações mostram concordâncias e discrepâncias qualitativas e quantitativas entre perfis simulados e medidos das concentrações de gases e distribuições granulométricas do particulado. Isso indica a necessidade de aperfeiçoamentos na modelagem fenomenológica, notadamente com relação às correlações e dados empíricos utilizados. Apesar das discrepâncias, o modelo apresenta bons resultados quantitativos de eficiência de absorção de enxofre em comparação com os dados experimentais.

Palavras chaves: Fluidização, modelagem fenomenológica, combustão, carvão, calcário.

ABSTRACT

MORAES, A. A. U. (2011). **Modelagem e simulação da combustão de carvão mineral com alto teor de cinzas com dessulfuração por calcário**. 254 f. Tese (Doutorado), Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2011.

Energy generation through coal combustion imposes heavy environmental impacts due to pollutant emissions. The process of fluidized bed combustion distinguishes in this context allowing for emission reductions of SO_x and NO_x above 90%. The design, scaling-up, and optimization of fluidized bed reactors are mostly empirical, through small-scale demonstration plant developments. The costs and times of implementation involved in those developments are huge, making theoretical tools of analysis highly desirable. In this work modeling and simulation are performed for atmospheric bubbling fluidized bed combustion of high ash high sulfur coals, including desulfurization by limestone. A phenomenological approach to modeling is applied. Comparison of predictions are made against empirical measurements performed in the NETF pilot plant, and parametric studies are developed to evaluate reactor performances. The comparisons show both agreements and disagreements, qualitative as well as quantitative, between predictions and measured gas concentrations and particulate size distributions. This points to the necessity for improvements on the phenomenological modeling procedure that was applied, notably regarding the empirical correlations and data that were considered. Despite the discrepancies, the model produces good quantitative results of sulfur absorption efficiency in comparison to the empirical data

Keywords: Fluidization, phenomenologic modeling, Combustion, coal, limestone.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 - Comportamento do leito com mudanças na velocidade do gás, adaptado de Howard (1989).....	37
Figura 1.2 – Diagrama de classificação de particulado fluidizado (GELDART, 1973).	38
Figura 1.3 - Esquema simplificado de um combustor de leito fluidizado borbulhante atmosférico. 1) Leito, 2) Placa distribuidora, 3) Soprador, 4) Corpo do reator, 5) isolante térmico, 6) Trocadores de calor no leito, 7) Trocadores de calor no freeboard, 8) Sistema de alimentação de particulado, 9) Ciclone;e 10) Sangria.....	41
Figura 3.1 - Esquema do elemento de bitola $r \pm \Delta r/2$ utilizado no balanço conservativo.....	59
Figura 3.2 - Perspectiva do elemento $r \pm \Delta r/2$ com incremento ϕ em suas bordas.....	63
Figura 3.3 - Ilustração das possíveis trocas gasosas entre as regiões do reator.....	86
Figura 3.4 - Esquema ilustrativo de um elemento de volume na fase de bolhas.....	88
Figura 3.5 - Esquema ilustrativo de um elemento de volume na fase de emulsão.....	92
Figura 3.6 - Esquema ilustrativo do elemento de freeboard.....	97
Figura 5.1 - Fluxograma do procedimento de simulação do modelo matemático (NAG – processo iterativo utilizando NAG <i>libraries</i>).	123
Figura 5.2 - Esquema da ordem hierárquica das subrotinas e funções do código computacional de simulação. Pontos em vermelho indicam menor ordem da hierarquia, em amarelo subrotinas da <i>libraries</i> NAG e em azul claro subrotina ou função de auxílio aos cálculos das rotinas NAG	127
Figura 6.1 – Perfis das distribuições granulométricas do carvão CE-4500 e calcário Ipéuna.	130
Figura 6.2 - Pontos de alimentação de carvão na superfície do leito.....	131

Figura 6.3 - Perfis das concentrações de SO_2 e O_2 nas fases de emulsão e bolhas dadas por simulação para os testes 19 (sem uso de calcário) e 20 (com uso de calcário), com velocidade de fluidização de 0,33m/s. 137

Figura 6.4 - Perfis das concentrações de SO_2 e O_2 nas fases de emulsão e bolhas dadas por simulação para os testes 21 (sem uso de calcário) e 22 (com uso de calcário), com velocidade de fluidização de de 0,47m/s..... 138

Figura 6.5 - Comparações dos resultados do modelo (linha tracejada) com dados empíricos (símbolos) dos perfis das concentrações de SO_2 no leito nas seções (0,-125mm), (0,0) e (0,125mm). Testes 19 e 20. 140

Figura 6.6 - Comparações dos resultados do modelo (linha tracejada) com dados empíricos (símbolos) dos perfis das concentrações de SO_2 no leito nas seções (0,-125mm), (0,0) e (0,125mm). Testes 21 e 22. 141

Figura 6.7 - Comparações dos resultados do modelo (linha tracejada) com dados empíricos (símbolos) dos perfis das concentrações de O_2 no leito nas seções (0,-125mm), (0,0) e (0,125mm). Testes 19 e 20. 142

Figura 6.8 - Comparações dos resultados do modelo (linha tracejada) com dados empíricos (símbolos) dos perfis das concentrações de O_2 no leito nas seções (0,-125mm), (0,0) e (0,125mm). Testes 21 e 22. 143

Figura 6.9 - Comparações dos resultados do modelo (linha tracejada) com dados empíricos (símbolos) dos perfis das concentrações de SO_2 ao longo da altura do *freeboard*. Testes 19 e 20..... 146

Figura 6.10 - Comparações dos resultados do modelo (linha tracejada) com dados empíricos (símbolos) dos perfis das concentrações de SO_2 ao longo da altura do *freeboard*. Testes 21 e 22..... 147

Figura 6.11 - Comparações dos resultados do modelo (linha tracejada) com dados empíricos (símbolos) dos perfis das concentrações de O_2 ao longo da altura do *freeboard*. Testes 19 e 20..... 148

Figura 6.12 - Comparações dos resultados do modelo (linha tracejada) com dados empíricos (símbolos) dos perfis das concentrações de O_2 ao longo da altura do <i>freeboard</i> . Testes 21 e 22.	149
Figura 6.13 – Perfis das distribuições granulométricas dos núcleos carbonáceos e cinzas, no leito e elutriado, obtidos por simulação para o teste 19.....	154
Figura 6.14 - Perfis das distribuições granulométricas dos núcleos carbonáceos, cinzas e calcário, no leito e elutriado, obtidos por simulação para o teste 20.	155
Figura 6.15 - Perfis das distribuições granulométricas dos núcleos carbonáceos e cinzas, no leito e elutriado, obtidos por simulação para o teste 21.....	156
Figura 6.16 - Perfis das distribuições granulométricas dos núcleos carbonáceos, cinzas e calcário, no leito e elutriado, obtidos por simulação para o teste 22.	157
Figura 6.17 – Comparações dos resultados do modelo com dados empíricos dos perfis das distribuições granulométricas no leito (A) e no elutriado (B) do teste 19. Diâmetros médios superficial: $D_{m,sup} = 295 \mu m$ (empírico - leito), $D_{m,sup} = 514 \mu m$ (simulado - leito); $D_{m,sup} = 40 \mu m$ (empírico - elutriado), $D_{m,sup} = 33 \mu m$ (simulado - elutriado).	159
Figura 6.18 - Comparações dos resultados do modelo com dados empíricos dos perfis das distribuições granulométricas no leito (A) e no elutriado (B) do teste 20. Diâmetros médios superficial: $D_{m,sup} = 305 \mu m$ (empírico-leito), $D_{m,sup} = 550 \mu m$ (simulado-leito); $D_{m,sup} = 32 \mu m$ (empírico - elutriado), $D_{m,sup} = 69 \mu m$ (simulado - elutriado).	160
Figura 6.19 - Comparações dos resultados do modelo com dados empíricos dos perfis das distribuições granulométricas no leito (A) e no elutriado (B) do teste 21. Diâmetros médios superficial: $D_{m,sup} = 247 \mu m$ (empírico - leito), $D_{m,sup} = 527 \mu m$ (simulado - leito); $D_{m,sup} = 41 \mu m$ (empírico - elutriado), $D_{m,sup} = 30 \mu m$ (simulado - elutriado).	161
Figura 6.20 - Comparações dos resultados do modelo com dados empíricos dos perfis das distribuições granulométricas no leito (A) e no elutriado (B) do teste 22. Diâmetros médios superficial: $D_{m,sup} = 356 \mu m$ (empírico - leito), $D_{m,sup} = 559 \mu m$ (simulado - leito); $D_{m,sup} = 40 \mu m$ (empírico - elutriado), $D_{m,sup} = 25 \mu m$ (simulado - elutriado).	162
Figura 6.21 – Comparação das concentrações de descargas de O_2 simuladas e experimentais dos testes 1 a 22.....	165

Figura 6.22 - Comparação das concentrações de descargas de SO_2 simuladas e experimentais dos testes 1 a 22.	165
Figura 6.23 - Comparação da eficiência de absorção de enxofre simuladas e experimentais dos testes 1 a 22.	166
Figura A. 1 - Esquema de queima da partícula de carvão com altos teores de cinzas, e as condições de contorno para concentrações de O_2 em torno do núcleo carbonáceo da partícula.....	184
Figura A. 2 - Esquema da absorção de SO_2 pela partícula de calcário, e as condições de contorno das concentrações de SO_2 em torno da partícula.	190
Figura B. 1 - Esquema do reator de leito fluidizado atmosférico borbulhante. 1) Corpo do reator; 2) Sistema de alimentação de particulado; 3) Sistema de tratamento dos gases de exaustão; 4) Sistema de alimentação dos gases de fluidização; 5) Sistema de sangria e nível do leito; 6) Sistema de partida e aquecimento; 7) sondas de análise; 8) Linha de amostragem de gases e analisadores ;e 9) Sistema de aquisição de dados.....	196
Figura B. 2 - Esquema do corpo do reato, 1) Câmara plena ou plenum, 2) Câmara de combustão, e 3), 4), 5) e 6) Módulos do freeboard.	197
Figura B. 3 - Vista do primeiro e segundo módulos do reator durante manutenção..	198
Figura B. 4 - Vista externa do reator na região do <i>freeboard</i> com sondas de amostragem posicionadas. Em círculos vermelhos, os orifícios de amostragem.	199
Figura B. 5 - Vista superior da câmara de combustão no interior do reator. Ao fundo, dispositivo de acoplagem entre a câmara de combustão e o módulo do <i>freeboard</i> , entrada de alimentação de carvão, bocal do maçarico e sondas de amostragem posicionadas na câmara de combustão.	200
Figura B. 6 - Painel de controle geral do reator. A) Chave de força do painel. B) Variadores de frequência de alimentação. C) Chave de força do compressor SOMA. D) Controlador de partida a gás GLP.....	201
Figura B. 7 - Curva de calibração do variador de frequência da alimentação do calcário IPEÚNA-SP de mesma distribuição granulométrica apresenta naTabela B. 2.....	201

Figura B. 8 - Curva de calibração do variador de frequência da alimentação do carvão CE-4500 de mesma distribuição granulométrica apresenta na Tabela B. 3	202
Figura B. 9 - Aglomeração do carvão na entrada do sistema de alimentação do carvão antes das modificações. A) Estágio inicial da aglomeração. B) Aglomeração em estágio crítico com obstrução total da entrada de carvão para o reator.	203
Figura B. 10 - Esquema da camisa d'água utilizada no sistema de alimentação de carvão.....	203
Figura B. 11 - Vista da vareta de varrimento com imagens destacadas da ponta e do sistema de acoplamento com o duto de alimentação.....	204
Figura B. 12 - Vista externa da entrada de alimentação de carvão. A) Camisa d'água. B) Vareta de aço de varrimento do duto de alimentação.....	204
Figura B. 13 - Vista do reservatório de armazenagem do material capturado pelo termo ciclone.....	206
Figura B. 14 - Sistema de tratamento dos gases de exaustão. A) Termo ciclone. B) Filtro de manga, e ao fundo, torre de suporte do termo ciclone.....	206
Figura B. 15 - Vista dos bocais da sangria e suas respectivas válvulas de controle. Na foto, reator operando com o uso do segundo bocal de controle do nível do leite.	208
Figura B. 16 - Vista do silo móvel. A) Silo acoplado ao sistema de sangria. B) Silo desacoplado para pesagem e retirada de material sangrado.	209
Figura B. 17 - Vistas externa A) e interna B) do queimador e sensor óptico no reator.	210
Figura B. 18 - Perfil da temperatura de aquecimento do leite durante partida com uso de GLP e carvão mineral.	210
Figura B. 19 - Sondas de amostragem confeccionadas no NETeF. A) Sonda de análise de gases na câmara de combustão. B) Sonda de análise de gases e temperaturas nos módulos do <i>freeboard</i> . C) Sonda de análise de temperatura no leite.....	212

Figura B. 20 - Dispositivos para retenção e captura de sólidos nas sondas de amostragem de gases. A) Esquema da haste inserida no interior do reator. B) Silo de captura posicionada na saída dos gases das sondas para analisadores.	213
Figura B. 21 - Entupimento de sondas de amostragem de gases com uso apenas da área da seção transversal da haste	213
Figura B. 22 - Posições das sondas de amostragens de gases na câmara de combustão, nos módulos do freeboard e na exaustão.	214
Figura B. 23 - Vista do sistema de tratamento de gases da linha de análise dos gases. Filtro de aço inoxidável com fibra de vidro não higroscópico e caixa condensadora.	216
Figura B. 24 - Analisadores de gases.	216
Figura B. 25 - Esquema da linha de análise dos gases. Utilizada mangueira de teflon com 10,0 <i>mm</i> de diâmetro externo para ligação entre as partes do sistema.	217
Figura B. 26 - Perfil da distribuição granulométrica da areia de quartzo.	220

LISTAS DE TABELAS

Tabela 2.1 – Resumo de modelos de combustores de leito fluidizado.....	46
Tabela 2.2 – Nomenclatura utilizada na Tabela 2.1.	49
Tabela 5.1 - Descrição das subrotinas e funções presentes no atual estado do código computacional de simulação apresentado na Figura 5.2.	124
Tabela 6.1 - Composição química elementar parcial do carvão CE-4500 de forma normalizada (MORITA, 2009).	130
Tabela 6.2 - Análise imediata do carvão CE-4500 (MORITA, 2009).....	130
Tabela 6.3 - Composição química elementar parcial (% massa/% massa) do calcário dolomítico de Ipeúna	131
Tabela 6.4 -Principais parâmetros do modelo e dados geométricos do reator.	132
Tabela 6.5 – Principais parâmetros experimentais de vários experimentos no reator de leito fluidizado piloto do NETeF utilizados na comparação do modelo fenomenológico.	135
Tabela 6.6 – Diâmetros de divisão entre as classes de particulados <i>critical fines</i> , <i>small</i> s e <i>large</i> s dadas por simulação, e os coeficientes de taxa de atrito das cinzas e calcário para os testes 19 a 22.	150
Tabela 6.7 – Porcentagem de carga mássica por espécie sólida no leito e massa total do leito dadas por simulação, e carga de combustível e massa do leito obtidas empiricamente para os testes 19 a 22.	151
Tabela 6.8 – Porcentagem de carga mássica por espécie sólida no elutriado e carga mássica de combustível no elutriado dados, respectivamente, por simulação e experimentalmente para os testes 19 a 22.	151
Tabela 6.9 – Comparação das concentrações de gases de descarga do reator e as eficiências de absorção de enxofre simuladas e experimentais dos testes 1 a 22.....	163
Tabela B. 1 - Distribuição granulométrica da areia de Quartzo.	220
Tabela B. 2 - Distribuição granulométrica do calcário dolomítico Ipeúna utilizado neste trabalho.	221

Tabela B. 3 - Distribuição granulométrica do CE-4500 utilizado neste trabalho.	222
Tabela B. 4 - Condições operacionais médias utilizadas nos testes.....	222
Tabela B. 5 – Principais parâmetros operacionais dos testes empíricos.	227
Tabela B. 6 - Médias e desvios das concentrações de gases captados pelo sistema de aquisição de dados do teste 0.33C4.88L0T1108.....	229
Tabela B. 7 - Concentrações dos gases obtidas visualmente dos analisadores de gases do teste 0.33C4.88L0T1108.....	230
Tabela B. 8 - Médias e desvios das concentrações de gases captados pelo sistema de aquisição de dados do teste 0.33C4.88L1.81T1113.....	231
Tabela B. 9 - Concentrações dos gases obtidas visualmente dos analisadores de gases do teste 0.33C4.88L1.81T1113.....	232
Tabela B. 10 - Médias e desvios das concentrações de gases captados pelo sistema de aquisição de dados do teste 0.47C5.45L0T1123.....	233
Tabela B. 11 - Concentrações dos gases obtidas visualmente dos analisadores de gases do teste 0.47C5.45L0T1123.....	234
Tabela B. 12 - Médias e desvios das concentrações de gases captados pelo sistema de aquisição de dados do teste 0.47C5.45L2.02T1123.....	235
Tabela B. 13 - Concentrações dos gases obtidas visualmente dos analisadores de gases do teste 0.47C5.45L2.02T1123.....	236
Tabela B. 14 - Distribuição granulométrica do leito (sangria) do teste 0.33C4.88L0T1108.	238
Tabela B. 15 - Distribuição granulométrica do elutriado do teste 0.33C4.88L0T1108.	238
Tabela B. 16 - Distribuição granulométrica do leito (sangria) do teste 0.33C4.88L1.81T1113.....	239
Tabela B. 17 - Distribuição granulométrica do elutriado do teste 0.33C4.88L1.81T1113.....	239

Tabela B. 18 - Distribuição granulométrica do leito (sangria) do teste 0.47C5.45L0T1123.....	240
Tabela B. 19 - Distribuição granulométrica do elutriado do teste 0.47C5.45L0T1123.	240
Tabela B. 20 - Distribuição granulométrica do leito (sangria) do teste 0.47C5.45L2.02T1123.....	241
Tabela B. 21 - Distribuição granulométrica do elutriado do teste 0.47C5.45L2.02T1123.....	241
Tabela B. 22 – Carga de material combustível presente na sangria e elutriado do teste 0.33C4.88L0T1108.....	243
Tabela B. 23 - Carga de material combustível presente na sangria e elutriado do teste 0.33C4.88L1.81T1113.....	243
Tabela B. 24 – Carga de material combustível presente na sangria e elutriado do teste 0.47C5.45L0T1123.....	244
Tabela B. 25 - Carga de material combustível presente na sangria e elutriado do teste 0.47C5.45L2.02T1123.....	244
Tabela B. 26 – Taxa de <i>overflow</i>	245
Tabela An. 1 - do polinômio de Fouda e Capes (1976).....	249
Tabela An. 2 - Constantes do coeficiente de arrasto em função do <i>Reynolds</i> da partícula (MORSI e ALEXANDER, 1972).....	252

LISTA DE SÍMBOLOS

A	Área da seção transversal do leito, m^2 .
A_0	Relação da área da seção transversal do leito associada por injetor, m^2 .
A_B	Área da seção transversal do leito ocupada por bolhas, m^2 .
a_m	Coefficientes da equação (a.6), <i>adimensional</i> .
Ar	Número de <i>Archimedes</i> , <i>adimensional</i> .
b_i	Coefficiente da distribuição <i>Rosin-Rammler</i> para o sólido i , <i>adimensional</i> .
$C_{0,i}$	Concentração da espécie gasosa i na alimentação (região de jatos), $kmol/m^3$.
$C_{0,i}(r)$	Função definida, equação (3.21), $1/m$.
$C_{1,i}(r)$	Função definida, equação (3.22), $1/m^2$.
$C_{2,i}(r)$	Função definida, equação (3.23), $1/m^2$.
$C_{3,i}(r)$	Função definida, equação (3.24), $1/m^2$.
$C_{B,i}(h)$	Concentração molar da espécie gasosa i na fase de bolha ao longo da altura do leito, $kmol/m^3$.
C_d	Coefficiente de arrasto, <i>adimensional</i> .
$\bar{C}_{E,i}$	Concentração molar média da espécie gasosa i na emulsão, $kmol/m^3$.
$C_{E,i}(x, y)$	Concentração molar da espécie gasosa i na emulsão na coordenada (x, y) , $kmol/m^3$;
$C_{F,i}(z)$	Concentração molar da espécie gasosa i no <i>freeboard</i> na altura z , $kmol/m^3$

$C_{leito,i}(x,y,z)$ Concentração molar da espécie gasosa i no leito na posição x , y e z , $kmol/m^3$;

$C_{O_2}(\xi)$ Concentração de oxigênio no raio ξ da partícula de carvão, $kmol/m^3$.

$C_{O_2,l}$ Concentração de oxigênio na interface da matriz de cinzas e do núcleo carbonáceo, $kmol/m^3$.

$C_{O_2,p}$ Concentração de oxigênio na emulsão, $kmol/m^3$.

$C_{O_2,s}$ Concentração de oxigênio na superfície externa da partícula de carvão, $kmol/m^3$.

$C_{SO_2}(\xi)$ Concentração de dióxido de enxofre no raio ξ da partícula de calcário, $kmol/m^3$.

$C_{SO_2,p}$ Concentração de dióxido de enxofre na emulsão, $kmol/m^3$.

$C_{SO_2,s}$ Concentração de dióxido de enxofre na superfície externa da partícula de calcário, $kmol/m^3$.

D_a Coeficiente de difusão molecular dos gases através da camada de cinzas, m^2/s .

$d_B(h), d_B$ Diâmetro da bolha ao longo da altura do leito, ou na superfície do leito, m .

$D_{B,i}$ Coeficiente de difusão mássica do gás i na fase de bolhas, m^2/s .

d_{Bmax} Máximo tamanho estável de uma bolha, m .

D_{e0} Difusividade efetiva do SO_2 nos poros da partícula de calcário antes da sulfatação, m^2/s ;

$D_{E,i}$ Coeficiente de difusão mássica do gás i na emulsão, m^2/s .

$D_{F,i}$ Coeficiente de difusão mássica do gás i no *freeboard*, m^2/s .

D_g	Coeficiente de difusão molecular gás/gás, m^2/s .
D_i	Diâmetro da peneira i , m .
$d_{m,mássico}$	Diâmetro médio mássico, mm .
$d_{m,sup}$	Diâmetro médio superficial, mm .
$\left. \frac{dr}{dt} \right)_i$	Taxa de encolhimento para o sólido i , m/s .
E	Coeficiente de difusão efetivo na emulsão, m^2/s .
$F(\lambda)$	Fluxo mássico total de partículas elutriadas pela ejeção da esteira das bolhas, kg/m^2s .
$f\left(\frac{\Delta l}{d_B}\right)$	Função probabilidade normal da distância entre duas bolhas consecutivas próximas da superfície do leito, <i>adimensional</i> .
$F_{0,i}$	Taxa de alimentação do sólido i para o leito, kg/s .
F_{0v}	Razão entre a taxa mássica de sangria e a carga do leito, l/s .
f_1	Fator de ajuste da equação (4.48), s ;
F_{cri}	Fluxo mássico de <i>critical fines</i> arrastados do leito para o <i>freeboard</i> e elutriados do reator, kg/m^2s .
$F_{cri,i}$	Fluxo mássico de <i>critical fines</i> do sólido i arrastado e elutriados do leito, kg/m^2s
F_e	Taxa de elutriação total, kg/s .
$F_{e,i}$	Taxa de elutriação do sólido i , kg/s .
F_{est}	Fluxo mássico de partículas ejetadas para o <i>freeboard</i> proveniente da esteira das bolhas, kg/m^2s .

f_{est} Fração volumétrica ocupada pela esteira de partículas nas bolhas atravessando o leito, *adimensional*.

$F_{est,i}$ Fluxo mássico de partículas do sólido i ejetadas para o *freeboard* proveniente da esteira da bolha, kg/m^2s .

$F_{L+,i}(z)$ Fluxo mássico ascendente de *larges* do sólido i ao longo da altura z do *freeboard*, kg/m^2s .

$F_{L-,i}(z)$ Fluxo mássico descendente de *larges* do sólido i ao longo da altura do *freeboard*, kg/m^2s .

$F_{S+,i}(z)$ Fluxo mássico ascendente de *smalls* do sólido i ao longo da altura do *freeboard*, kg/m^2s

F_v Taxa mássica de sangria, kg/s .

$F_{v,i}$ Taxa mássica de sangria do sólido i , kg/s .

g Aceleração da gravidade, m/s^2 .

h Altura ao longo do leito acima do distribuidor, m .

H_f Altura do *freeboard*, m .

H_l Altura do leito expandido, m .

H_{mf} Altura do leito no estado de mínima fluidização, m .

J_{O_2} Descarga molar difusiva de O_2 na superfície externa de uma partícula de carvão, $kmol/s$.

J_{SO_2} Descarga molar difusiva de SO_2 na superfície externa de uma partícula de calcário, $kmol/s$.

k_1^*, k_2^*, k_3^* Constantes da equação do coeficiente de arrasto, equação (B.II), *adimensional*.

$k_{1,i}$	Coeficiente de taxa de atrito para espécie de sólido i , $1/m$.
$K_{BE,i}$	Coeficiente de troca de massa de um gás i entre bolhas e emulsão (difusão+convecção), m/s .
k_c	Coeficiente de taxa de reação intrínseco do carvão, m/s .
K_c	Coeficiente global de taxa de reação de combustão de carvão, m/s .
$k_{calcário}$	Coeficiente inicial de taxa de reação intrínseco do calcário baseado na área BET, m/s .
k_l	Coeficiente de taxa de reação intrínseco da absorção do SO_2 pelo calcário, m/s .
K_l	Coeficiente global da taxa de absorção do SO_2 pelas partículas de calcário, m/s .
k_{l0}	Coeficiente inicial de taxa de reação intrínseco de absorção de SO_2 pela partícula de calcário, m/s .
k_{st}, k_n, k_{tr}	Coeficientes nas equações para velocidade terminal, respectivamente, para o regime laminar, turbulento e transitório. <i>adimensional</i> .
l	Raio do núcleo carbonáceo de uma partícula de carvão, m .
$l_{m.c}$	Máximo raio do núcleo carbonáceo no leito, m .
M	Massa total de sólidos no leito, kg .
M_c	Massa total de carvão no leito incluindo cinzas e núcleos carbonáceos, ou massa total de núcleos carbonáceos, kg .
$M_c(r, l)$	Massa total de partículas de carvão no leito com raio externo da partícula r e raio interno do núcleo carbonáceo l , kg .
$m_c(r, l)$	Massa de uma partícula de carvão no leito com raio externo da partícula r e raio interno do núcleo carbonáceo l , kg .
M_{esp}	Número de espécies gasosas analisadas ou de interesse, <i>adimensional</i> .

M_i	Massa total de sólidos i no leito, kg .
M_l	Massa total de calcário no leito, kg .
$m_l(r)$	Massa de uma partícula de calcário com raio r , kg .
$M_l(r)$	Massa total no leito de partículas de calcário com raio r , kg .
$m_{p,i}(r)$	Massa de uma partícula do sólido i de raio r , kg .
n	Número de coalescimento das bolhas, <i>adimensional</i> .
$N_{B,i}$	Fluxo molar da espécie gasosa i na fase de bolha, $kmol/m^2s$.
$n_c(r,l)$	Número de partículas de carvão no leito com raio externo da cinza r e raio interno do núcleo carbonáceo l , <i>adimensional</i> .
$N_{E,i}$	Fluxo molar da espécie gasosa i na emulsão, $kmol/m^2s$.
N_{esp}	Número de espécies de sólidas presentes no leito, <i>adimensional</i> .
$N_{F,i}$	Fluxo molar da espécie gasosa i no <i>freeboard</i> , $kmol/m^2s$.
η_i	Coefficiente de distribuição <i>Rosin-Rammler</i> para o sólido i , <i>adimensional</i> .
$n_l(r)$	Número de partículas de calcário no leito com raio r , <i>adimensional</i> .
n_{SO_2}	Eficiência de absorção de enxofre, <i>adimensional</i> .
P	Probabilidade de coalescência de duas bolhas próximo da superfície do leito, <i>adimensional</i> .
$P_{0,i}(r)$	Função densidade de probabilidade da distribuição granulométrica de alimentação do sólido i , $1/m$.
$P_{1,r}(r)$	Função densidade de probabilidade da distribuição granulométrica do leito relativo ao termo fonte de alimentação, $1/m$.

$P_{2,r}(r)$ Função densidade de probabilidade da distribuição granulométrica do leito relativo ao termo fonte de atrito, l/m .

$P_{3,r}(r)$ Função densidade de probabilidade da distribuição granulométrica do leito relativo ao termo fonte de elutriação, l/m .

$P_a(r)$ Função densidade de probabilidade da distribuição granulométrica de cinzas no leito, l/m .

$P_c(l)$ Função densidade de probabilidade da distribuição granulométrica de núcleos de carvão no leito, l/m .

$P_{cri,i}(r)$ Função densidade de probabilidade da distribuição granulométrica do *critical fines* para espécie de sólido i , l/m .

$P_{e,i}(r)$ Função densidade de probabilidade da distribuição granulométrica do elutriado do sólido i , l/m .

$P_{f,i}(r)$ Função densidade de probabilidade da distribuição granulométrica de finos gerados por atrito no leito o sólido i , l/m .

$P_i(r)$ Função densidade de probabilidade da distribuição granulométrica do sólido i no leito, l/m .

P_k Probabilidade de coalescência consecutivas de k bolhas próximo da superfície do leito, *adimensional*.

$P_l(r)$ Função densidade de probabilidade da distribuição granulométrica de calcário no leito, l/m .

$P_{v,i}(r)$ Função densidade de probabilidade da distribuição granulométrica do sólido i na sangria, l/m .

Q_B Fluxo volumétrico de bolhas atravessando o leito, m^3/s .

Q_{est} Fluxo volumétrico da esteira de partículas nas bolhas atravessando o leito, m^3/s .

$\bar{r}$	Raio médio das partículas no leito ou raio da partícula média do sólido
$i, m.$	
r	Raio da partícula ou elemento de corte da partícula, $m.$
$R_{atr,i}$	Taxa de geração de finos por atrito do sólido i , $kg/s.$
$r_{B,j}$	Taxa de reação química da espécie gasosa j na fase de bolhas, $kmol/m^3 s.$
$r_{cri,i}$	Máximo raio de partícula da espécie i na classe <i>critical fines</i> , $m.$
$r_{div,i}$	Máximo raio da partícula da classe <i>smalls</i> da espécie sólida i , $m.$
$r_{e,i}$	Máximo raio de partícula da espécie sólida i no elutriado, $m.$
$r_{E,j}$	Taxa de reação química da espécie j na fase da emulsão, $kmol/m^3 s.$
Re_p	Número de Reynolds da partícula no <i>freeboard</i> , <i>adimensional</i> .
$Re_{\bar{r}}$	Número de <i>Reynolds</i> da partícula média do leito, <i>adimensional</i> .
R_{est}	Razão estequiométrica, $KmolO_2/KmolO_2.$
Re_t	Número de Reynolds de queda livre da partícula, <i>adimensional</i> .
$r_{f,i}$	Máximo raio de partícula da espécie i gerada por atrito, m
$r_{F,j}$	Taxa de reação química da espécie j no <i>freeboard</i> , $kmol/m^3 s.$
$r_{m,a}$	Máximo raio da partícula de cinza no leito, $m.$
$r_{m,i}$	Máximo raio de partícula da espécie sólida i no leito, $m.$
$r_{m,l}$	Máximo raio da partícula de calcário no leito, $m.$
$R_{rea,c}$	Taxa de combustão total de carvão no leito, $kmol/m^3 s.$
$R_{rea,c}(r, l)$	Taxa de combustão de partículas de carvão com raio externo das cinzas
r e de raio interno do núcleo de carbonáceo l	$kmol/s.$
$R_{rea,l}$	Taxa de absorção total de enxofre no leito por calcário, $Kmol/m^3 s.$

$R_{rea,l}(r)$	Taxa de absorção de enxofre no leito pela partícula de calcário de raio r , $kmol/s$.
S_0	Área BET da partícula de calcário, m^2/m^3 ;
Sc	Número de <i>Schmidt</i> , <i>adimensional</i>
Sh	Número de <i>Sherwood</i> , <i>adimensional</i> .
T_l	Temperatura do leito, K .
t_{res}	Tempo de residência da partícula de calcário, s ;
T_s	Temperatura na superfície do núcleo carbonáceo, K .
U	Velocidade de fluidização, m/s .
$U_B, U_B(h)$	Velocidade de ascensão de bolhas, do gás em <i>plug flow</i> na fase de bolha, velocidade da bolha na superfície do leito, ou velocidade da bolha ao longo da altura do leito, m/s .
$\bar{U}_B$	Velocidade média de ascensão das bolhas, m/s .
U_F	Velocidade dos gases de combustão no <i>freeboard</i> , m/s .
$U(r_1, r_2)$	Função filtro unitário, definida como 1 no intervalo $r_1 > r \geq r_2$ e nula nos demais pontos, <i>adimensional</i> .
U_{mf}	Velocidade de mínima fluidização, m/s .
$U_p(z)$	Velocidade vertical da partícula no <i>freeboard</i> , m/s ;
$\bar{U}_t$	Velocidade terminal de queda livre da partícula de tamanho médio do leito, m/s
V_E	Volume de emulsão, m^3 .
X_i	Fração mássica do sólido da espécie i no, <i>adimensional</i> .

$X_{i,elutriado}$ Fração mássica de material elutriado retido entre duas peneiras consecutivas i e $i+1$, *adimensional*.

$X_{i,leito}$ Fração mássica de material do leito retido entre duas peneiras consecutivas no leito i e $i+1$, *adimensional*.

$Y'_{rea,i}(r)$ Derivada da taxa de reação para a espécie de sólido i , *l/s*.

$Y_{atr,i}$ Taxa de encolhimento devido ao atrito para a espécie de sólido i , *m/s*.

$Y_{rea,i}(r)$ Taxa de encolhimento por reação química, ou taxa de reação química, da espécie de sólido i , *m/s*.

z Altura ao longo do *freeboard* acima do topo do leito ou altura do leito acima do distribuidor de gases, *m*.

Z Máxima altura alcançada no *freeboard* pela partícula *larges* de diâmetro médio no leito, *m*.

LETRAS GREGAS

α Coeficiente estequiométrico para reações do oxigênio com o carbono fixo, *adimensional*.

α_B Fração da área transversal do leito ocupado pelos caminhos das bolhas próximas da superfície do leito, *adimensional*.

$\alpha_{j,i}$ Coeficiente estequiométrico de formação ou consumo do gás i através da reação com j , *adimensional*.

γ Ângulo entre a direção de aproximação de duas bolhas e a vertical, *graus*.

$\delta [x]$ Função delta de Dirac, *adimensional*.

Δl	Distância centro a centro entre bolhas consecutivas próximas da superfície do leito, <i>m</i> .
Δl_m	Valor médio de Δl , <i>m</i> .
Δr	Elemento de raio, <i>m</i>
ε	Fração de vazios no leito, <i>adimensional</i>
ε_B	Fração volumétrica média ocupada pelas bolhas próximas da superfície do leito em relação ao volume do leito, <i>adimensional</i> .
ε'_B	Fração volumétrica local ocupada pelas bolhas próximas da superfície do leito em relação ao volume do leito, <i>adimensional</i> .
ε_f	Fração de vazios no <i>freeboard</i> , <i>adimensional</i> .
ε_{mf}	Fração de vazios no leito no estado de mínima fluidização, <i>adimensional</i> .
ζ_1	Relação entre a velocidade de ejeção das partículas e a velocidade de bolha no topo do leito, <i>adimensional</i> .
ζ_2	Fração residual de <i>larges</i> fluindo além da altura de desengajamento de transporte, <i>adimensional</i> .
ζ_3	Coefficiente de transporte no <i>freeboard</i> que governa a captura de <i>smalls</i> ascendentes pelo fluxo de <i>larges</i> descendentes, <i>m.s/kg</i> .
ϕ	Razão de equivalência, <i>adimensional</i> .
ϕ_1	Função definida, equação (b.5), <i>m/s²</i> .
ϕ_2	Função definida, equação (b.6), <i>1/s</i> .
ϕ_3	Função definida, equação (b.7), <i>1/m</i> .
ϕ_p	Esfericidade da partícula, ou esfericidade média das partículas no leito, <i>adimensional</i> .

λ m .	Menor valor entre a altura de desengajamento Z e a altura do <i>freeboard</i> ,
μ_g	Viscosidade aparente do ar no leito, $kg/m.s$.
ξ	Distância radial, m .
$\xi_{ejet,k}$	Relação entre o volume da esteira ejetado na superfície do leito pelo volume da esteira, <i>adimensional</i> .
ρ_a	Densidade aparente da matriz de cinzas, kg/m^3 .
ρ_c	Densidade aparente do carvão, kg/m^3 .
ρ_g	Densidade dos gases no leito, kg/m^3 .
ρ_i	Densidade aparente do sólido i , ou do gás i , kg/m^3 .
ρ_l	Densidade aparente do calcário, kg/m^3 .
$\rho_p, \bar{\rho}_p$ kg/m^3 .	Densidade das partículas, densidade média das partículas no leito,
σ	Desvio padrão, equação (3.46), <i>adimensional</i> .
Υ equação (a.7), m/s	Função pré-definida para cálculo da velocidade terminal transitória,
φ	Incremento dado nas bordas do elemento $r \pm \Delta r/2$, m .
χ	Fator de fluxo bolha/emulsão, <i>adimensional</i> .
Ω equação (a.8), $1/m$.	Função pré-definida para cálculo da velocidade terminal transitória,

SUBSCRITOS

Para espécies sólidas:

a	Cinzas;
c	Núcleos carbonáceos;
$c+a$	Partículas de carvão;
l	Calcários.

Para espécies gasosas:

O_2	Oxigênio;
SO_2	Dióxido de enxofre.

SUMÁRIO

CAPITULO 1 - INTRODUÇÃO	35
1.1 Descrição dos regimes de fluidização e classes de particulados	36
1.2 Descrição de um combustor de leito fluidizado borbulhante à pressão atmosférica	39
1.3 Objetivos	43
CAPITULO 2 - ESTADO DA ARTE	45
2.1 Modelos de combustores de leito fluidizado borbulhante.....	45
CAPITULO 3 - DESCRIÇÃO DOS MODELOS MATEMÁTICOS FENOMENÓLOGICOS FUNDAMENTAIS	57
3.1 Modelo matemático para distribuição granulométrica do particulado.....	59
3.1.1 Equação de balanço populacional para partículas da espécie <i>i</i>	66
3.2 Modelo de arraste e elutriação das partículas no reator	70
3.2.1 Arrasto das partículas do leito para o <i>freeboard</i>	70
3.2.2 Modelo fenomenológico de arraste no <i>freeboard</i> e elutriação.....	79
3.2.3 Taxa total de elutriação e distribuição granulométrica do elutriado	85
3.3 Modelo matemático para determinação das concentrações gasosas	85
3.3.1 Região de jatos	86
3.3.2 Região de bolha.....	87
3.3.3 Região da emulsão	91
3.3.4 Região do <i>freeboard</i>	97
3.4 Principais correlações e parâmetros gerais	100
3.4.1 Parâmetros gerais relacionados à hidrodinâmica do leito	100
3.4.2 Coeficientes de transporte de massa	103
CAPITULO 4 - MODELO MATEMÁTICO FENOMENOLÓGICO DA ABFBC DE CARVÃO MINERAL COM ALTO TEOR DE CINZA E DESSULFURAÇÃO POR CALCÁRIO	105
4.1 Introdução	105

4.2	Equações do modelo fenomenológico	107
4.2.1	Equações das distribuições granulométricas do particulado	107
4.2.2	Equações de arraste e elutriação do particulado	110
4.2.3	Determinação de concentrações de gases	113
CAPITULO 5 - PROCEDIMENTO DE SOLUÇÃO E ROTINA COMPUTACIONAL.....		119
5.1	Procedimento numérico	119
5.2	Compilação e criação do programa executável de simulação	120
CAPITULO 6 - RESULTADOS E DISCUSSÕES.....		129
6.1	Principais dados de entrada do modelo	129
6.2	Resultados de simulações e comparação com dados experimentais	134
6.2.1	Perfil das concentrações de gases SO_2 e O_2	136
6.2.2	Perfil das distribuições granulométricas.....	150
6.2.3	Eficiência de absorção de enxofre.....	163
CAPITULO 7 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES.....		167
7.1	Conclusões.....	167
7.2	Sugestões	169
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....		171
APÊNDICE A - MODELAGEM DAS TAXAS DE REAÇÕES QUÍMICAS HETEROGÊNEAS.....		181
APÊNDICE B - EXPERIMENTOS NO REATOR DE LEITO FLUIDIZADO DO NETEF.....		195
ANEXO A - VELOCIDADE TERMINAL DE QUEDA LIVRE		247
ANEXO B - ALTURA DE DESENGAJAMENTO DE TRANSPORTE (TDH)		251

CAPITULO 1 - INTRODUÇÃO

O controle e o uso das diversas formas da energia sempre representaram desde o início da humanidade, e principalmente após a revolução industrial, em progresso, qualidade de vida e aumento da produtividade. Sendo que a vida moderna nos padrões atuais seria inconcebível sem os consumos praticados nestes últimos séculos.

Em 2006, os combustíveis fósseis foram responsáveis por mais de 80% de toda a energia primária utilizada no planeta, sendo 26% proveniente do carvão. Na geração de energia elétrica, o carvão arcou com 41%¹ do total. Neste mesmo ano, no Brasil, o uso de carvão mineral apresentou-se em valores modestos em relação à média mundial, sendo 6,4% como fonte de energia primária e 1,6% na produção de energia elétrica². Segundo Gavronski (2005), o consumo mundial de energia elétrica deverá aumentar entre 43 a 71% até o ano de 2030, em relação ao ano de 2005, na medida em que melhorem os padrões de vida e cresçam as populações nos países em desenvolvimento, como é o caso do Brasil.

O Brasil dispõe e utiliza largamente usinas hidroelétricas para a geração de energia. Porém, o potencial para implementação de novas usinas nas regiões sul e sudestes, onde se encontra a maior parte do centro consumidor, encontra-se próximo da exaustão, enquanto nas regiões norte e nordeste há grandes questionamentos dos ponto de vista ecológico e financeiro (GAVRONSKI, 2007). O petróleo e o gás natural estão sujeitos as oscilações do mercado mundial, trazendo incertezas e podendo representar um grande ônus à balança comercial brasileira. A energia nuclear ainda depara-se com enormes restrições técnicas relacionadas à segurança e extenso tempo de construção. As fontes de energia renováveis como biomassa, solar, eólica e outras, ainda permanecem inviáveis para exploração em larga escala.

Dentro deste contexto, o carvão mineral brasileiro apresenta-se como uma das alternativas de suprimento de energia para as futuras demandas que irão ocorrer no Brasil nas próximas décadas. Segundo Ávila (2008), as reservas deste mineral conhecidas no Brasil, são suficientes para exploração em larga escala para vários séculos nos mesmos padrões

¹ www.worldcoal.org/resources/coal-statistics/, acessado em julho de 2010.

² Plano Nacional de Energia 2030: Geração termoelétrica – carvão mineral. Ano base de 2006- 2007. MME: EPE, Brasília 2007.

utilizados pelos USA, onde o carvão mineral responde por mais de 50% de energia elétrica gerada. No Brasil, mais de 99% das reservas conhecidas de carvão mineral estão localizadas na região sul (REDIVO, 2002).

Gavronski (2007) apresenta quatro alternativas básicas de tecnologias para queima limpa de carvão, que são:

- Combustão em caldeira de carvão pulverizado;
- Combustão em leito fluidizado à alta pressão;
- Ciclo combinado de gaseificação de carvão acoplado a turbina a gás;
- Combustão de carvão mineral em leito fluidizado à pressão atmosférica com adição de absorvente calcário no controle de emissões sulfurosas.

Neste trabalho considera-se a queima de carvões minerais com altos teores de cinzas e enxofre em reatores de leito fluidizado borbulhante à pressão atmosférica.

1.1 Descrição dos regimes de fluidização e classes de particulados

A fluidização é o processo físico observado quando um leito composto de partículas sólidas é atravessado por um fluxo contínuo de gases ascendente em vazão tal que o arrasto produzido sustenta o peso do particulado dentro do vaso. Em baixas vazões ou velocidades de fluidização, o leito ainda continua estático; o gás ao percorrer os interstícios entre as partículas gera uma força ascendente de arrasto que ainda não é suficiente para vencer o peso do particulado. Este estágio é denominado leito fixo.

À medida que a velocidade de fluidização aumenta as forças de arrasto também aumentam havendo um momento em que se igualam ao peso das partículas. Nesse ponto ocorre o estágio de mínima fluidização, ou regime de fluidização incipiente. Nesta situação, o leito comporta-se como um líquido.

Aumentos sucessivos na velocidade do gás de fluidização possibilitam o surgimento de novos estágios ou regimes de fluidização. O primeiro dos estágios observados, após a fluidização incipiente, é o regime borbulhante. Neste regime, o excesso de ar além do

necessário para a mínima fluidização provoca o surgimento de bolhas, que aumentam de tamanho ao longo da altura do leito por coalescência de bolhas menores, e estouram na superfície do leito.

Em determinadas condições dos reatores, com leito fundo e diâmetro de vaso reduzido, um regime particular de fluidização borbulhante pode ser alcançado, denominado pistonado ou *slug flow*. Este é caracterizado pelo surgimento de bolhas que alcançam tamanho igual ao diâmetro do vaso envolvente do leito. Estas bolhas, ao passarem pela superfície do leito, levam consigo uma quantidade apreciável de partículas em um fluxo pistonado. Percebe-se neste regime uma grande flutuação da queda de pressão dos gases entre a placa distribuidora e a posição acima do leito.

Aumentos na velocidade de fluidização dão origem a novos regimes de fluidização. O regime de fluidização denominado turbulento surge logo acima do regime borbulhante, e é caracterizado por maiores oscilações de pressão no leito e substituição do padrão de bolhas por vazios irregulares.

Figura 1.1 - Comportamento do leito com mudanças na velocidade do gás, adaptado de Howard (1989).

Na sequência tem-se o regime de fluidização rápida, que ocorre quando a velocidade do gás de fluidização iguala e ultrapassa a velocidade terminal de queda livre das partículas. Esse regime é caracterizado pela formação de aglomerados de partículas, que são completamente arrastados do reator e re-circulados. Com incrementos na velocidade de fluidização ainda maiores, alcança-se regimes de transporte pneumático, onde o escoamento é uniformizado e todo o particulado é rapidamente arrastado do reator pelo fluxo dos gases.

Um esquema ilustrativo do comportamento do leito com mudanças da velocidade de fluidização é apresentado na Figura 1.1.

Para caracterizar o comportamento das partículas quando fluidizadas, Geldart (1973) criou uma classificação bem aceita e citada na literatura, onde os sólidos particulados são divididos em quatro grupos denominados em: A, B, C, e D (Figura 1.2).

Figura 1.2 – Diagrama de classificação de particulado fluidizado (GELDART, 1973).

As partículas da classe A apresentam pequeno tamanho médio e/ou baixa densidade (inferiores a $1400 kg.m^{-3}$). Este tipo de particulado é facilmente fluidizado e o leito expande-se consideravelmente, enquanto as bolhas não surgem de imediato logo acima da velocidade de fluidização. Ao cortar o gás de fluidização o leito permanece aerado por período considerável.

As partículas do tipo B possuem bitola variando entre 100 a 1000 μm , e densidade aparente entre 1400 a 4500 kg.m^{-3} . A expansão do leito nesse tipo de fluidização de partículas é pequeno quando comparada com a expansão da classe A. O surgimento de bolhas ocorre imediatamente acima da velocidade de mínima fluidização, e o leito colapsa rapidamente quando o gás de fluidização é cortado. A areia é um exemplo típico desta classe.

As partículas da classe C apresentam pequeno tamanho de particulado, geralmente menores que 30 μm , e/ou baixa densidade aparente. As forças interpartículas desta classe dificultam muito sua fluidização. Normalmente são formados canais preferenciais de gases no leito, e a introdução de agitação, seja ela por vibração ou pulsação da corrente dos gases, é uma das alternativas para que se promova uma fluidização mais uniforme. A farinha e o cimento são exemplos desta classe.

A classe de particulado do tipo D apresenta altas bitolas e densidades superiores a das outras classes. A velocidade dos gases para promover a fluidização é alta, e a mistura de sólidos é pobre, com alta tendência à formação de jorros. Aconselha-se que a fluidização deste tipo de particulado ocorra em leitos rasos. O cascalho e grão de cereais são exemplos da classe D.

1.2 Descrição de um combustor de leito fluidizado borbulhante à pressão atmosférica

O processo de combustão de carvão mineral em reatores de leito fluidizado ocorre pela adição contínua de partículas de carvão em um leito fluidizado a altas temperaturas composto em sua maioria de partículas inertes como cinzas e areia. Segundo La Nauze (1985), as cargas de carvão são tipicamente inferiores a 2% da massa total do leito, e em raras exceções ultrapassa 5% da massa total. Desta forma, cada partícula de combustível pode ser suposta envolvida por uma grande quantidade de partículas inertes que não competem com o oxigênio necessário para a sua combustão, e fornecem a energia necessária para o início da combustão, em vista de sua elevada capacidade térmica.

As partículas de carvão, ao penetrarem no meio fluidizado sofrem diversos processos físicos e químicos. Inicialmente, com um rápido aquecimento, a umidade e material volátil do

carvão são liberados por um curto período de tempo, sendo que os voláteis podem queimar nas regiões vizinhas da partícula de carvão ou difundirem-se para outras regiões onde queimam ou continuam seu fluxo. Paralelamente, fragmentação pode ocorrer devido ao aumento de pressões internas, sendo a partícula dividida em diversas partículas menores. O material combustível restante, constituído principalmente de material inerte e carbono fixo, queima de forma mais lenta e a temperaturas superiores à do leito, enquanto as partículas movem-se caoticamente por todo o meio fluidizado.

Durante o período de queima do carbono fixo, efeitos abrasivos entre o particulado ou entre as partículas e superfícies internas do reator tendem a produzir partículas finas, que são rapidamente elutriadas do reator pelo fluxo dos gases de fluidização, enquanto a partícula original reduz progressivamente seu tamanho. O tamanho do particulado pode também ser alterado por uma nova fragmentação, ocasionada pela fragilização das pontes de ligações na estrutura das cinzas geradas na combustão.

Adições de calcário são amplamente utilizadas para promover a redução das emissões dos gases de enxofre gerados na combustão do carvão. As partículas de calcário, ao serem introduzidas no reator, sofrem uma rápida calcinação, onde os cristais de carbonato de cálcio são decompostos termicamente. Simultaneamente à calcinação, e por períodos maiores de tempo, os gases de enxofre são capturados pelos óxidos resultantes da calcinação, até o entupimento dos poros devido à sulfatação, ou até que elas sejam elutriadas ou sangradas do combustor.

Na Figura 1.3 são apresentados os principais componentes de um combustor de leito fluidizado. Tem-se, basicamente, um meio fluidizado composto por partículas sólidas de cinzas, carvão e calcário (1). Na base do leito fluidizado esta localizada uma placa distribuidora de gases de fluidização (2), que deve suportar o peso do leito e promover uma boa uniformidade da distribuição dos gases de fluidização, que é fornecido por sopradores ou compressores (3). A estrutura do reator é composta por um recipiente metálico (4), normalmente fabricado em aço inoxidável, em corpo único ou segmentado. Este recipiente é envolvido por isolante térmico (5), que garante segurança e aumento na eficiência térmica. Trocadores de calor são posicionados tanto na região de leito denso (6), quanto no *freeboard* (7). A alimentação de particulado (8) pode ser por gravidade ou pneumática. Na saída dos gases do reator, um ciclone (9) garante a captura dos finos elutriados, que podem ser

reinseridos pela base do leito e garantindo um aumento na eficiência da combustão do carvão e na utilização do calcário. O controle do nível do leito é realizado por dispositivos de sangria (10).

Figura 1.3 - Esquema simplificado de um combustor de leito fluidizado borbulhante atmosférico. 1) Leito, 2) Placa distribuidora, 3) Soprador, 4) Corpo do reator, 5) isolante térmico, 6) Trocadores de calor no leito, 7) Trocadores de calor no freeboard, 8) Sistema de alimentação de particulado, 9) Ciclone; e 10) Sangria.

Nota-se que este sistema de combustão de carvão mineral vem aumentando significativamente sua participação no mercado devido a um melhor atendimento às legislações ambientais, cada vez mais exigentes para o uso deste tipo de insumo, já que são relatadas eficiências de remoção de gases de SO_x superiores a 90% (GAVRONSKI, 2007).

Dentre as principais características que tornam atraente o uso desta tecnologia na queima de carvões minerais, Tureso (2004) enumera as seguintes:

- Altos coeficientes globais de transferência de calor entre o leito e os tubos imersos nele, tipicamente na faixa $88-175 \text{ W / m}^2 \cdot ^\circ \text{C}$;
- Ótimas condições para reações de combustão, onde a agitação do leito permite grande contato gás-sólido;
- Admite altos teores de inertes na câmara de combustão;
- Permite operar a temperaturas de processo mais baixas que os reatores convencionais, em faixas de temperatura variando entre 800 e 850°C, diminuindo assim os custos e problemas com os materiais do reator;
- O controle de poluição é facilitado, pois a emissão de SO_2 pode ser minimizada com a adição de calcários ou dolomitas, enquanto a taxa de formação de NO_x é sensivelmente diminuída pelo uso de temperaturas de processo menores que as praticadas em sistemas convencionais de queima como a pulverizada;
- Apresenta alta eficiência de combustão;
- Permite flexibilidade quanto a granulometria e qualidade do carvão utilizado;
- As características de seu funcionamento facilitam o manuseio dos sólidos utilizados na alimentação, estocagem ou retirados do processo.

1.3 Objetivos

Dentro os objetivos deste trabalho, têm-se:

- Modelar e simular o processo de combustão em leito fluidizado atmosférico borbulhante de carvão mineral com altos teores de cinzas e enxofre com dessulfuração por calcário, através de uma abordagem fenomenológica;
- Obter novos dados e compilar informações de resultados experimentais já obtidos na planta piloto do NETeF³;
- Comparar as previsões do modelo fenomenológico com os resultados experimentais;
- A partir dos resultados de comparação, identificar deficiências de modelagem e as necessidades empíricas para futuros aperfeiçoamentos do modelo.

³ NETeF: Núcleo de Engenharia Térmica e Fluidos.

CAPITULO 2 - ESTADO DA ARTE

2.1 Modelos de combustores de leito fluidizado borbulhante

A eficiência de combustão de carvões minerais e a redução de emissões de poluentes em um reator de leito fluidizado borbulhante são altamente influenciadas por diversos fatores como: temperatura do reator, velocidade de fluidização, excesso de ar, altura do leito e *freeboard*, pontos de alimentação dos sólidos, distribuições granulométrica das partículas, e características físicas e químicas dos sólidos empregados.

O custo de projeto via empiricismo, para escalonamento e otimização via plantas de demonstração são elevadíssimos. Assim, modelos fenomenológicos podem se tornar importantes ferramentas no desenvolvimento de projeto, desde que seus sub-modelos e o próprio modelo global sejam validados dentro de uma faixa razoável de experimentos.

Na Tabela 2.1 é apresentada uma classificação dos principais modelos encontrados na literatura, enquanto na Tabela 2.2 é descrita a nomenclatura utilizada. Os diversos modelos são comparados com relação aos sub-modelos propostos para descrever a hidrodinâmica do reator, a devolatilização e combustão do carvão, a elutriação das partículas, a captura de SO_2 , a formação e redução de NO_x e com relação ao nível de validação dos resultados obtidos.

Tabela 2.1 – Resumo de modelos de combustores de leito fluidizado.

AUTOR(ES)	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	L	M
(GORDON e AMUNDSON, 1976)	I	a	I	f	I,IV	sim	c	não	III	c	III	sim
(CHEN e SAXENA, 1977)	II	a	I	f	I	não	a	não	III	c	III	sim
(CHEN e SAXENA, 1978)	II	a	II	f	I,V	não	a	não	III	b	III	não
(GORDON, CARAM e AMUNDSON, 1978)	I	a	I	f	IV	sim	c	não	III	c	III	não
(RAJAN, KRISHNAN e WEN, 1978)	III	b	II	b.2	II	sim	c	não	III	c	III	sim
(SAROFIM e BEÉR, 1978)	I	a	I	e	I	sim	a	sim	I	c	I	sim
(RAJAN e WEN, 1980)	III	b	II	c	II	sim	a,b	sim	II	c	II	sim
(CONGALIDIS e GEORGAKIS, 1981)	III	a	II	a,c	IV	sim	a,b	não	III	c	III	não
(PARK, LEVENSPIEL e FITZGERALD, 1981)	IV	d	I	b.1	II	sim	a	sim	I	b	III	não
(BUKUR e AMUNDSON, 1982)	I	a	I	f	I	sim	c	não	III	b	III	sim

Continua

Continuação

AUTOR(ES)	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	L	M
(OVERTURF e REKLAITIS, 1983)	III	a	II	a,c	II	sim	a,b	não	I	c	III	sim
(BORGHI, SAROFIM e BEÉR, 1985)	I	a	I	e	II	sim	c	não	III	c	III	não
(PRETO, 1986) ⁴	III	c	II	a,c	II	sim	a,b	sim	II	b	II	sim
(LEMCOFF, 1988)	I	c	I	f	IV,V	sim	c	sim	II	c	III	sim
(SOUZA-SANTOS, 1989)	I	c	I	b.1	IV	sim	a,b	sim	I	b	II	sim
(TREVIÑO, HERRERA e GARCIA-YBARRA, 1990)	I	a	I	f	I	não	c	não	III	c	III	não
(MILIOLI, 1991)	I	a	I	f	II	não	a,b	não	I	c	III	sim
(ADÁNEZ et al ., 1992)	I	c	I	a,b.1	II	sim	a	sim	I	c	III	sim
(LIN et al., 1993)	IV	b	I	a	I	não	c	não	III	a	I	sim

Continua

⁴ PRETO, F. **Studies and modeling of fluidized bed combustion of coal**. Tese (Doutorado). Queen's University. Kingston. (1986). (apud BREM, 1995).

Continuação

AUTOR(ES)	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	L	M
(SRIRAMULU et al., 1996)	II	c	I	f	II	sim	c	não	III	c	III	sim
(REDDY e SINHA, 1997)	II	c	I	f	II	não	c	não	III	c	III	sim
(MILIOLI, 1998)	I	a	I	b.1	II,V	não	b	sim	I	b	III	não
(SRINIVASAN et al., 1998)	II	a	I	f	-	-	c	sim	I	c	III	sim
(HUILIN et al., 1999)	III	c	I	f	II	não	c	não	III	c	III	sim
(KULASEKARAN, LINJEWILE e AGARWAL, 1999)	II	c	I	f	II	sim	c	sim	I	c	III	sim
(CHEN et al., 2001)	II	c	I	b.2	II	sim	c	sim	I	c	I	sim
(HAMEL e KRUMM, 2001)	III	a	II	e	IV	não	a	sim	I	c	c	sim
(ALTINDAG, GOGEBAKAN e SELÇUK, 2004)	II	a	I	a,d,e	III	sim	a,b	sim	I	b	c	sim
(ALAGÖZ, 2006)	II	a	a	a,d,e	III	sim	a,b	sim	I	b	c	sim

Tabela 2.2 – Nomenclatura utilizada na Tabela 2.1.

A. Modelo de fluidização no leito:

- I. Modelo bifásico; Fase de bolhas e emulsão;
- II. Modelo trifásico; Fases de bolhas, emulsão, nuvem-rastro de partículas e bolhas;
- III. Modelo de compartimentos;
- IV. Modelo monofásico ou de regime lento de bolhas, sem distinção entre fases de bolhas e emulsão.

B. Padrão de fluxo de gases no leito:

- a. Fase de bolhas em *plug flow* e emulsão bem misturada;
- b. Bem misturado em ambas as fases;
- c. Em *plug flow* em todas as fases;
- d. Em *plug flow* no leito, mas sem distinção entre as fases.

C. Mistura de sólidos no leito:

- I. Bem misturado;
- II. Bem misturado em cada compartimento.

D. Modelo de devolatilização do carvão de alimentação:

- a. Uniforme na fase densa
- b. Devolatilização instantânea
 - 1. Nos pontos de alimentação;
 - 2. Ao longo da seção transversal na altura da alimentação;
- c. Taxa de devolatilização ocorre na mesma taxa da mistura de sólidos;
- d. Modelo de movimento da partícula;
- e. Cinética de devolatilização;
- f. Não considerado.

E. Cinética da combustão do carvão:

- I. Difusão externa controladora da reação;
- II. Taxa de reação controlada pelos efeitos combinados da cinética química da reação na superfície da partícula e difusão externa, com oxidação de *CO* para *CO*₂ assumida ser rápida;
- III. Taxa de reação controlada pelos efeitos combinados da cinética química da reação na superfície da partícula e difusão externa, com oxidação de *CO* para *CO*₂ controlada pela cinética química;
- IV. Taxa de oxidação de *CO* é dada pelo equilíbrio de diversas reações heterogêneas e homogêneas;
- V. Incluída difusão pela camada de cinzas.

F. Balço de energia em torno da partícula ?:

Sim/Não.

Continua

Continuação

G. Elutriação das partículas:

- a. Queima do *char* até tamanho de elutriação;
- b. Admitido atrito no encolhimento até o tamanho de elutriação;
- c. Não considerado.

H. Combustão no *freeboard* ?:

Sim/Não.

I. Padrão de fluxo de gases no *freeboard*:

- I. Fluxo de gases em *plug flow* com sólidos dispersos;
- II. Bem misturado com sólidos dispersos.
- III. Não considerado.

J. Captura de SO_2 :

- a. Modelo de dessulfuração;
- b. Equações cinéticas semi-empíricas de dessulfuração;
- c. Não considerado.

L. Formação e redução de NO_x :

- I. Modelo de formação e redução;
- II. Equações cinéticas semi-empíricas de formação e redução do NO_x ;
- III. Não considerado.

M. Validação?:

Sim/Não.

A hidrodinâmica do leito pode ser descrita pela teoria de uma fase, duas fases e três fases. Park, Levenspiel e Fitzgerald (1981), e Lin et al (1993) simplificam a região do leito denso com modelo monofásico, no qual não há distinção entre bolhas e emulsão.

A teoria bifásica de fluidização, descrita inicialmente por Tommey e Johnstone (1981) e posteriormente estendida por diversos outros pesquisadores (DAVIDSON e HARRISON, 1963; PARTRIDGE e ROWE, 1966; XAVIER, LEWIS e DAVIDSON, 1978; DARTON, 1979), é assumida na maior parte dos modelos apresentados para descrição da hidrodinâmica do leito. Esta teoria assume a existência de duas fases: a emulsão e bolhas. A emulsão, ou fase de particulado, compreende todos os sólidos presentes no reator e está em estado constante de mínima fluidização. A fase de bolhas inclui somente gases, sendo que todo o gás de alimentação excedente em relação ao estado de mínima fluidização flui por esta fase. A diferença entre os vários modelos baseados na teoria bifásica de fluidização referem-se ao comportamento das bolhas durante sua ascensão pelo leito, e aos perfis de fluxos de gases nas bolhas e emulsão, podendo-se assumir fluxos bem misturados axialmente ou em *plug flow*.

Rajan, Krishnam e Wen (1978), Rajan e Wen (1980), Congalidis e Georgakis (1981), Overturf e Reklaitis (1983), Preto⁵ (1986), Huilin et al. (1999), Hamel e Krumm (2001) assumem o modelo bifásico de fluidização, sendo o leito dividido em compartimentos ao longo da altura. Assumem gases da emulsão bem misturados em cada compartimento, com exceção de Preto (1986) e Hulin et al. (1999), que assumem o fluxo de gases na emulsão em *plug flow*. Gordon e Amundson (1976), Gordon, Caram e Amundson (1978) e Sarofim e Beér (1978) utilizam a proposta desenvolvida por Davidson e Harrison (1963), e assumem que as bolhas possuem o mesmo tamanho e estão uniformemente distribuídas pelo leito. Lemcoff (1988), Souza-Santos (1989), Treviño, Herrera e Garcia-Ybarra (1990), Milioli (1991), Adánez et al. (1992) e Milioli (1998) assumem tamanho das bolhas variável ao longo da altura do leito, e que as trocas gasosas entre bolhas e emulsão sejam axialmente distribuídas. Todos estes autores utilizam o modelo de crescimento de bolhas de Darton et al. (1977)

Kunii e Levenspiel (1969) estenderam as modificações propostas por Partridge e Rowe (1966) e propuseram a teoria trifásica de fluidização, que assume a existência de três fases: bolhas, emulsão e nuvens de partículas em torno das bolhas. As trocas gasosas ocorrem

⁵ PRETO, F. **Studies and modeling of fluidized bed combustion of coal**. Tese (Doutorado). Queen's University. Kingston. (1986). (apud BREM, 1995).

em duas etapas consecutivas, entre as bolhas e sua nuvem de partículas, e entre a nuvem de partículas e a emulsão. Chen e Saxena (1977), Chen e Saxena (1978), Sriramulu et al . (1996), Reddy e Sinha (1997), Srinivasan et al . (1998), Kulasekaran, Linjewile e Argwal (1999), Chen et al . (2001), Altindag, Gogebakan e Selçuk (2004) e Alagöz (2006) utilizam esta teoria.

Em todos os modelos adota-se a hipótese de que os sólidos na fase de emulsão estejam bem misturados. No caso dos modelos que utilizam a descrição do leito em compartimentos axiais, assume-se que os sólidos em cada compartimento também estejam bem misturados.

Entre as principais hipóteses adotadas para descrever o processo de devolatilização do carvão de alimentação estão: uniformemente distribuído por todo leito, instantânea no ponto de alimentação ou ao longo da seção transversal do ponto de alimentação, em proporção a taxa de mistura de sólidos no leito, modelo de movimento da partícula e pela cinética química de devolatilização. Congalidis e Georgakis (1981), Overturf e Reklaitis (1983) e Preto (1986)⁶ assumem que ela ocorra na mesma taxa de mistura de sólidos e de forma uniforme por toda a fase de emulsão. Rajan, Krishnan e Wen (1978), Park, Levenspiel e Fitzgerald (1981) Souza-Santos (1989), Adánez et al . (1992), Milioli (1998) e Chen et al . (2001) consideram devolatilização instantânea no ponto de alimentação ou ao longo da seção transversal do ponto de alimentação. Sarofim e Beér (1978), Borghi, Sarofim e Béer (1985), e Hamel e Krumm (2001) consideram a cinética química de devolatilização. Altindag, Gogebakan e Selçuk (2004), e Alagöz (2006) utilizam um modelo de movimento da partícula combinado com a cinética, e assumem que a devolatilização seja uniforme em toda a emulsão.

A combustão do carvão devolatilizado é assumida, na maioria dos modelos, de acordo com a proposta de Ross e Davidson (1981). Considera-se controle de reação por efeitos combinados da difusão de gases externa às partículas e cinética química da reação heterogênea da oxidação do carbono fixo na superfície das partículas para formar monóxido de carbono. Em muitos modelos considera-se que o produto desta reação oxida rapidamente na fase de emulsão ou bolhas para formar dióxido de carbono (RAJAN, KRISHNAN e WEN, 1978; RAJAN e WEN, 1980; PARK, LEVENSPIEL e FITZGERALD, 1981; OVERTURF e REKLAITIS, 1983; BORGHI, SAROFIM e BEÉR, 1985; PRETO (1986)⁶; MILIOLI, 1991; ADÁNEZ, ABANADES, et al ., 1992; SRIRAMULU, SANE, et al ., 1996; REDDY e

⁶ PRETO, F. **Studies and modeling of fluidized bed combustion of coal**. Tese (Doutorado). Queen's University. Kingston. (1986). (apud BREM, 1995).

SINHA, 1997; HUILIN, GUANGBU, et al ., 1999). Outros modelos assumem que a oxidação do monóxido de carbono ocorra por um mecanismo controlado pela cinética química, que pode ocorrer tanto na fase de emulsão quanto nas bolhas (ALTINDAG, GOGEBAKAN e SELÇUK, 2004; ALAGÖZ, 2006).

Chen e Saxena (1977), Chen e Saxena (1978), Sarofim e Beér (1978), Bukur e Amdundson (1982), Treviño, Herrera e Garcia-Ybarra (1990) e Lin et al . (1993) assumem que somente a difusão externa seja a controladora da reação de oxidação. Gordon e Amundson (1976), Gordon, Caram e Amundson (1978), Congalidis e Georgakis (1981), Lemcoff (1988), e Hamel e Krumm (2001) apontam que a taxa de oxidação do carbono fixo seja dada pelo equilíbrio cinético de reações químicas heterogêneas e homogêneas. Destes modelos, somente Lemcoff (1988) e Milioli (1998) incluem a difusividade imposta pela camada de cinzas reagidas na queima das partículas de carvão no leito, enquanto, Sousa-Santos (1988) e Adánez et al . (1992) incluem esta resistência somente nas partículas de carvão queimando na região do *freeboard*.

Em alguns modelos, para avaliação da cinética química na superfície da partícula de carvão em combustão, aplica-se um balanço de energia para determinação da temperatura de reação (GORDON e AMUNDSON, 1976; GORDON, CARAM e AMUNDSON, 1978; RAJAN, KRISHNAN e WEN, 1978; SAROFIM e BEÉR, 1978; RAJAN e WEN, 1980; CONGALIDIS e GEORGAKIS, 1981; PARK, LEVENSPIEL e FITZGERALD, 1981; BUKUR e AMUNDSON, 1982; OVERTURF e REKLAITIS, 1983; BORGHI, SAROFIM e BEÉR, 1985; PRETO, 1986⁷; LEMCOFF, 1988; SOUZA-SANTOS, 1989; ADÁNEZ et al ., 1992; LIN et al ., 1993; SRIRAMULU et al ., 1996; KULASEKARAN, LINJEWILE e AGARWAL, 1999; CHEN et al ., 2001; ALTINDAG, GOGEBAKAN e SELÇUK, 2004; ALAGÖZ, 2006). Chen e Saxena (1977), Chen e Saxena (1978), Treviño, Herrera e Garcia-Ybarra (1990), Milioli (1991), Lin et al . (1993), Milioli (1998), Hulin et al . (1999), e Hamel e Krumm (2001) utilizam uma temperatura média superior a do leito na superfície da partícula.

Outro fator importante no desempenho do reator está relacionado à elutriação das partículas devido ao fluxo de gases e/ou ejeção das partículas pelo estouro de bolhas na

⁷ PRETO, F. **Studies and modeling of fluidized bed combustion of coal**. Tese (Doutorado). Queen's University. Kingston. (1986). (apud BREM, 1995).

superfície do leito. A elutriação afeta diretamente as eficiências de combustão do carvão e de absorção de enxofre pelo calcário. Chen e Saxena (1977), Chen e Saxena (1978), Sarofim e Beér (1978), Park, Levenspiel e Fitzgerald (1981), Adánez *et al.* (1992), e Hamel e Krumm (2001) assumem que as partículas de carvão reduzem seu tamanho somente pelas reações químicas superficiais até um tamanho crítico, e a partir deste tamanho sejam elutriadas do reator pelo fluxo dos gases de fluidização. Rajan e Wen (1980), Congalidis e Georgakis (1981), OverTurf e Reklaitis (1983), Preto (1986)⁸ Souza-Santos (1989), Milioli (1991), Altidang, Gogebakan e Selçuk (2004) e Alagöz (2006) adotam que o encolhimento da partícula ocorra pelos efeitos simultâneos do atrito e reações químicas superficiais da partícula de carvão até o diâmetro crítico.

Milioli (1991) propôs um modelo fenomenológico de elutriação, onde além do tamanho crítico de elutriação, partículas grosseiras possam ser elutriadas devido à ejeção ocasionada pelo coalescimento e estouro de bolhas na superfície do leito. Este modelo foi estendido posteriormente em Milioli (1998) para partículas de carvão com altos teores de cinzas, e que queimam de acordo com o modelo *unreacted core*. Nesta nova versão, a elutriação de partículas de carvão até o tamanho crítico ocorre apenas pelos efeitos abrasivos entre as partículas, e sua elutriação representa também a elutriação de núcleos de carvão no seu interior.

A zona diluída acima da superfície do leito é definida como a região do *freeboard*. Estudos experimentais (ZENZ e WEIL, 1958; FUNG e HAMDULLAPUR, 1993) indicam que ela contém todo o espectro de partículas presentes no leito, e que a concentração de particulado decai ao longo da altura desta região. Esta região é negligenciada na maioria dos modelos já que as altas taxas de reações químicas e transferência de calor em tubos submersos ocorrem na região de leito denso. Porém, conforme o posicionamento dos pontos de alimentação de carvão para o reator e o seu teor de voláteis, os processos na região do *freeboard* afetam consideravelmente a eficiência da combustão devido à queima do material volátil.

Dentro dos modelos que tratam a combustão na região do *freeboard*, Rajan e Wen (1980) e Preto (1986)⁸ dividem o *freeboard* em compartimentos e assumem que o fluxo em

⁸ PRETO, F. **Studies and modeling of fluidized bed combustion of coal**. Tese (Doutorado). Queen's University. Kingston. (1986). (apud BREM, 1995).

cada um deles seja homogêneo e com os sólidos dispersos. Lemcoff (1988) adota que toda a região do *freeboard* esteja homogênea para a consideração da oxidação do monóxido de carbono. Sarofim e Beér (1978), Park, Levenspiel e Fitzgerald (1981), Souza-Santos (1989), Adánez et al . (1992), Milioli (1998), Srinivasan et al . (1998), Kulasekaran, Linjewile e Agarwal (1990), Chen et al. (2001), Hamel e Krumm (2001), Altidang, Gogebakan e Selçuk (2004) e Alagöz (2006) adotam que os fluxos de gases através do *freeboard* ocorra em *plug flow* e com os sólidos dispersos.

Uma das qualidades de combustores de leito fluidizado está em sua capacidade para queima carvões minerais de baixa qualidade, isto é, de baixo poder calorífico e altas concentrações de enxofre. A captura do enxofre gerado na combustão ocorre no próprio interior do reator pela adição de calcário, sendo que as temperaturas utilizadas neste tipo de processo encontram-se entre 800 e 900 °C para de máxima eficiência de dessulfuração. Estas temperaturas também possibilitam uma redução da emissão de NO_x , que em sua maioria ocorre pela oxidação do nitrogênio presente no combustível. Rajan e Wen (1990), Preto (1986)⁹, Souza-Santos (1986) e Lin et al . (1993) assumem a ocorrência destes dois fenômenos em seus modelos. Chen e Saxena (1977), Milioli (1998), Altidang, Gogebakan e Selçuk (2004) e Alagöz (2006) adotam somente a dessulfuração através do uso de um modelo semi-empírico, enquanto Rajan, Krishnan e Wen (1978) aplicam um modelo de grão para a análise da dessulfuração. Sarofim e Beér (1978) e Chen et al . (2001) utilizam modelos cinéticos químicos para avaliação da taxa de formação e redução de NO_x .

⁹ PRETO, F. **Studies and modeling of fluidized bed combustion of coal**. Tese (Doutorado). Queen's University. Kingston. (1986). (apud BREM, 1995).

CAPITULO 3 - DESCRIÇÃO DOS MODELOS MATEMÁTICOS FENOMENÓLOGICOS FUNDAMENTAIS

Neste capítulo são descritas as bases dos modelos matemáticos fenomenológicos desenvolvidos para a predição do processo de combustão em leito fluidizado de carvões minerais com altos teores de cinzas e enxofre incluindo absorção de gases de enxofre por calcários (MILIOLI, 1991; MILIOLI e FOSTER, 1995a; MILIOLI e FOSTER, 1995b; MILIOLI, 1998). Os modelos fundamentais baseiam-se na descrição hidrodinâmica do leito pela teoria bifásica de fluidização e caracterizam-se pela aplicação de balanços globais associados ao conhecimento fenomenológico do processo.

Para obtenção da distribuição granulométrica do particulado são aplicados balanços conservativos de massa envolvendo os efeitos interpartículas do atrito, reações químicas e elutriação. Considera-se espécies sólidas que, no caso mais geral, sofrem efeitos simultâneos de encolhimento de bitola tanto por reação química quanto por atrito.

O arraste e a elutriação do particulado são determinados a partir do conhecimento das distribuições granulométricas dos sólidos presentes no leito e de observações empíricas encontradas nestes tipos de reatores. Para o desenvolvimento deste modelo admite-se que as partículas de carvão e calcário sejam divididas em três classes de particulado conforme a relação de sua velocidade terminal de queda livre com a velocidade dos gases de arraste, e que são denominadas neste trabalho, em respectiva ordem crescente de tamanho, de *critical fines*, *smalls* e *larges*. As *critical fines* são partículas com velocidade terminal muito inferior a do gás de fluidização; *Smalls* são partículas com velocidade terminal inferior a do gás; E as *larges* são partículas com velocidade terminal superior a do gás.

As distribuições de concentrações de gases ao longo do reator são determinadas a partir de balanços mássicos conservativos das espécies gasosas de interesse, sendo consideradas as reações químicas relevantes e o transporte de massa entre as diferentes fases encontradas no reator.

Admite-se em toda a modelagem que a operação ocorra em regime permanente em um leito fluidizado borbulhante à pressão atmosférica e isotérmico. O conjunto de equações

conservativas e do modelo de arraste e elutriação é complementado por um grande número de correlações empíricas e semiempíricas que descrevem parâmetros associados à hidrodinâmica do leito e ao transporte de massa no meio fluidizado, às características físicas, abrasivas e reativas do material particulado, e ao arraste e transporte de particulado nos gases da combustão. A maioria destas correlações é apresentada no último tópico deste capítulo, enquanto algumas delas, quando necessárias, são apresentadas ao longo do desenvolvimento da modelagem. As correlações para a avaliação da velocidade terminal de queda livre e da altura de desengajamento de transporte são fornecidas, respectivamente, nos ANEXO A e ANEXO B.

3.1 Modelo matemático para distribuição granulométrica do particulado

A equação para a determinação granulométrica do particulado de uma determinada espécie sólida i presente no reator é obtida através de um balanço mássico conservativo em uma faixa do elemento de bitola contendo partículas da espécie sólida i com raios contidos entre $r - \Delta r/2$ a $r + \Delta r/2$, sendo r o raio médio do elemento de r (MILIOLI, 1991; MILIOLI e FOSTER, 1995a), Figura 3.1.

Figura 3.1 - Esquema do elemento de bitola $r \pm \Delta r/2$ utilizado no balanço conservativo.

Considera-se um sólido genérico i que sofra os efeitos de encolhimento de bitola tanto por atrito quanto por reação química, supondo-se que estes efeitos sejam simultâneos. Desenvolvimentos adicionais na equação conservativa são realizados no próximo capítulo levando-se em conta o modelo de encolhimento proposto para cada sólido i presente no reator.

Assim, as seguintes hipóteses e suposições são adotadas nesta modelagem:

- O reator está em regime permanente de operação, e isotérmico e bem misturado;
- O encolhimento da bitola de uma partícula pode ocorrer por atrito, reação química ou pelo efeito simultâneo de ambos os fenômenos;

- Adota-se que os finos gerados por atrito para um determinado sólido i possuam um máximo raio de bitola $r_{cri,i}$ e qualquer partícula com raio menor que este valor não sofra mais os efeitos da abrasão entre partículas. Este raio é definido como o máximo raio de uma partícula *critical fines*;

Assim, um balanço mássico de partículas do sólido i aplicado dentro do elemento r e com raios de partículas na faixa $r \pm \Delta r/2$ é escrito com:

$$\begin{aligned}
 & \begin{matrix} \left[\begin{matrix} \text{Taxa de} \\ \text{alimentação} \end{matrix} \right]_{r \pm \frac{\Delta r}{2}, i} & - & \left[\begin{matrix} \text{Taxa de} \\ \text{sangria} \end{matrix} \right]_{r \pm \frac{\Delta r}{2}, i} & - & \left[\begin{matrix} \text{Taxa de} \\ \text{elutriação} \end{matrix} \right]_{r \pm \frac{\Delta r}{2}, i} \\
 & \text{[I]} & & \text{[II]} & & \text{[III]} \\
 & + \left[\begin{matrix} \text{Taxa de partículas vindo do} \\ \text{elemento superior devido} \\ \text{ao encolhimento} \end{matrix} \right]_{r + \frac{\Delta r}{2}, i} & - & \left[\begin{matrix} \text{Taxa de partículas indo para} \\ \text{o elemento inferior devido} \\ \text{ao encolhimento} \end{matrix} \right]_{r - \frac{\Delta r}{2}, i} \\
 & & & \text{[IV]} & & \text{[V]} \\
 & - \left[\begin{matrix} \text{Taxa de encolhimento} \\ \text{de partículas dentro do} \\ \text{elemento sem deixá-lo} \end{matrix} \right]_{r \pm \frac{\Delta r}{2}, i} & + & \left[\begin{matrix} \text{Taxa de finos} \\ \text{gerados} \\ \text{por atrito} \end{matrix} \right]_{r \pm \frac{\Delta r}{2}, i} & = & 0 \\
 & & & \text{[VI]} & & \text{[VII]}
 \end{aligned}$$

Nas próximas seções, os termos deste balanço conservativo são desenvolvidos separadamente, e então compostos para obtenção do balanço populacional

A. Termo da taxa de alimentação

A taxa mássica de alimentação de partículas do sólido i pertencentes ao elemento $r \pm \Delta r/2$ é dada como:

$$[I] \equiv \left[F_{0,i} P_{0,i}(r) \Delta r \right] \quad (3.1)$$

Sendo,

$F_{0,i}$ Taxa de alimentação do sólido i para o leito, kg/s .

$P_{0,i}(r)$ Função densidade de probabilidade da distribuição granulométrica de alimentação do sólido i , l/m .

B. Termo da taxa de sangria (*Overflow*)

A taxa mássica de sangria de partículas do sólido i pertencentes ao elemento $r \pm \Delta r/2$ é fornecida por:

$$[III] \equiv [F_{v,i} P_{v,i}(r) \Delta r] \quad (3.2)$$

Sendo,

$F_{v,i}$ Taxa mássica de sangria do sólido i , kg/s .

$P_{v,i}(r)$ Função densidade de probabilidade da distribuição granulométrica do sólido i na sangria, l/m .

Com a hipótese de um leito bem misturado podemos supor que a distribuição granulométrica e a fração mássica do sólido i presente no sangrado sejam as mesmas contidas no leito. Isto permite supor que a razão da taxa mássica total de sangria em relação à massa do leito seja a mesma para qualquer sólido i conforme a seguinte expressão:

$$F_{0v} = \frac{F_v}{M} = \frac{F_{v,i}}{M_i} \quad (3.3)$$

Sendo,

F_v Taxa mássica de sangria, kg/s .

F_{0v} Razão entre a taxa mássica de sangria e a carga do leito, l/s .

M Massa total de sólidos no leito, kg .

M_i Massa total do sólido i no leito, kg .

Substituindo a equação (3.3) na equação (3.2) e notando que $P_{v,i}(r)$ seja igual a $P_i(r)$, temos que a taxa de mássica de partículas do sólido i saindo pela sangria na faixa granulométrica $r \pm \Delta r/2$ é dada como:

$$[\text{II}] \equiv [F_{0v} M_i P_i(r) \Delta r] \quad (3.4)$$

Sendo,

$P_i(r)$ Função densidade de probabilidade da distribuição granulométrica do sólido i no leito, $1/m$.

C. Termo da taxa elutriação

A taxa mássica de partículas sólidas i elutriadas do reator e contidas na faixa de bitolas $r \pm \Delta r/2$ é dada por:

$$[\text{III}] \equiv [F_{e,i} P_{e,i}(r) \Delta r] \quad (3.5)$$

Sendo,

$F_{e,i}$ Taxa de elutriação do sólido i , kg/s .

$P_{e,i}(r)$ Função densidade de probabilidade da distribuição granulométrica de elutriado do sólido i , $1/m$.

D. Termos da taxa de partículas atravessando as bordas do elemento devido ao encolhimento

As taxas mássicas de partículas atravessando as bordas do elemento devido ao encolhimento são as taxas mássicas de partículas do sólido i entrando e saindo do elemento $r \pm \Delta r/2$ devido ao encolhimento nas bordas $r + \Delta r/2$ e $r - \Delta r/2$.

Para desenvolvimento destes cálculos vamos definir um incremento positivo de φ em cada borda deste elemento como mostrado na Figura 3.2.

Figura 3.2 - Perspectiva do elemento $r \pm \Delta r/2$ com incremento φ em suas bordas.

A massa de partículas contidas no incremento φ na fronteira superior é dada como:

$$\left[M_i P_i(r) \varphi \right]_{r+\frac{\Delta r}{2}} \quad (3.6)$$

O tempo necessário para que as partículas contidas neste incremento atravessem-no para dentro do elemento $r \pm \Delta r/2$ dado por:

$$-\left[\frac{\varphi}{\left(\frac{dr}{dt} \right)_i} \right] \quad (3.7)$$

Sendo,

$$\left(\frac{dr}{dt} \right)_i \quad \text{Taxa de encolhimento para o sólido } i, m/s.$$

Dividindo a massa de partículas contidas no incremento φ , equação (3.6), pelo tempo necessário para que as partículas atravessem-no, equação (3.7), obtém-se a taxa mássica de partículas do sólido i vindo do elemento superior devido ao encolhimento, dada por:

$$[IV] \equiv -\left[M_i P_i(r) \left(\frac{dr}{dt} \right)_i \right]_{r+\frac{\Delta r}{2}} \quad (3.8)$$

Adotando-se os mesmos procedimentos para a borda inferior, obtém-se a taxa de partículas do sólido i saindo do elemento devido ao encolhimento como:

$$[V] \equiv - \left[M_i P_i(r) \frac{dr}{dt} \right]_i \Big|_{r-\frac{\Delta r}{2}} \quad (3.9)$$

Subtraindo a equação (3.9) da equação (3.8), e levando-se ao limite quando Δr tendendo a zero, temos que a taxa mássica de partículas do sólido i atravessando as bordas do elemento $r \pm \Delta r/2$ devido ao encolhimento resulta:

$$[IV]-[V] \equiv - \left[M_i P_i(r) \frac{dr}{dt} \right]_i \Big|_{r+\frac{\Delta r}{2}} + \left[M_i P_i(r) \frac{dr}{dt} \right]_i \Big|_{r-\frac{\Delta r}{2}} =$$

$$- \frac{d}{dr} \left[M_i P_i(r) \frac{dr}{dt} \right]_i \Big|_r \Delta r \quad (3.10)$$

E. Termo da taxa de encolhimento de partículas dentro do elemento sem deixá-lo

Determina-se agora a taxa mássica de partículas do sólido i encolhendo dentro do elemento de bitola $r \pm \Delta r/2$, mas sem deixá-lo. Assumindo que as partículas sejam esféricas, tem-se que a massa de uma partícula do sólido i de tamanho médio do elemento r seja dada como:

$$m_{p,i}(r) = \frac{4}{3} \pi r^3 \rho_i \quad (3.11)$$

Sendo,

$m_{p,i}(r)$ Massa de uma partícula do sólido i de raio r , kg .

ρ_i Densidade aparente do sólido i , kg/m^3 .

Então, a taxa mássica de encolhimento da partícula média r do elemento resulta:

$$-\frac{d}{dt}[m_{p,i}(r)] = -\frac{d}{dr}[m_{p,i}(r)]\left(\frac{dr}{dt}\right)_{r,i} = -4\pi r^2 \rho_i \left(\frac{dr}{dt}\right)_{r,i} \quad (3.12)$$

A massa de partículas contidas no elemento $r \pm \Delta r/2$ é dada por:

$$[M_i P_i(r) \Delta r] \quad (3.13)$$

Então, dividindo a equação (3.13) pela equação (3.11) e multiplicando pela equação (3.12) obtém-se a taxa mássica de encolhimento de partículas do sólido i dentro do elemento, sem deixá-lo, que resulta:

$$[\text{VI}] \equiv - \left[M_i P_i(r) \left(\frac{3}{r} \right) \left(\frac{dr}{dt} \right)_{r,i} \right] \quad (3.14)$$

F. Termo da taxa de finos gerados por atrito

A taxa mássica de finos gerados por atrito do sólido i indo para o elemento $r \pm \Delta r/2$ é dada como:

$$[\text{VII}] \equiv [R_{atr,i} P_{f,i}(r) \Delta r] \quad (3.15)$$

Sendo,

$P_{f,i}(r)$ Função densidade de probabilidade da distribuição granulométrica de finos gerados por atrito para o sólido i , l/m .

$R_{atr,i}$ Taxa mássica de finos gerados por atrito do sólido i , kg/s .

3.1.1 Equação de balanço populacional para partículas da espécie i

Compondo todos os termos de [I] a [VII] desenvolvidos nos itens anteriores obtém-se:

$$\begin{aligned} & \left[F_{0,i} P_{0,i}(r) \Delta r \right] - \left[F_{0v} M_i P_i(r) \Delta r \right] - \left[F_{e,i} P_{e,i}(r) \Delta r \right] - \frac{d}{dr} \left[M_i P_i(r) \frac{dr}{dt} \right]_i \Delta r + \\ & + \left[M_i P_i(r) \left(\frac{3}{r} \right) \frac{dr}{dt} \right]_i + \left[R_{atr,i} P_{f,i}(r) \Delta r \right] = 0 \end{aligned} \quad (3.16)$$

Para taxa de encolhimento do sólido i ocorrendo por atrito, reação química ou pelo efeito simultâneo de ambos, e considerando taxa de encolhimento por atrito independente do tamanho da partícula, tem-se:

$$\left(\frac{dr}{dt} \right)_i = \left(\frac{dr}{dt} \right)_{rea,i} + \left(\frac{dr}{dt} \right)_{atr,i} = Y_{rea,i}(r) + Y_{atr,i} \quad (3.17)$$

Sendo,

$Y_{rea,i}(r)$ Taxa de encolhimento por reação química para a espécie de sólido i , m/s .

$Y_{atr,i}$ Taxa de encolhimento devido ao atrito para a espécie de sólido i , m/s .

Substituindo a equação (3.17) na equação (3.16), e levando-se ao limite quando Δr tendendo a zero, teremos que a equação de balanço populacional para partículas da espécie i , que resulta:

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dr} [P_i(r)] + \left[\frac{Y'_{rea,i}(r) + F_{0v}}{Y_{rea,i}(r) + Y_{atr,i}} - \frac{3}{r} \right] P_i(r) = \frac{F_{0,i} P_{0,i}(r)}{M_i [Y_{rea,i}(r) + Y_{atr,i}]} + \\ & + \frac{R_{atr,i} P_{f,i}(r)}{M_i [Y_{rea,i}(r) + Y_{atr,i}]} - \frac{F_{e,i} P_{e,i}(r)}{M_i [Y_{rea,i}(r) + Y_{atr,i}]} \end{aligned} \quad (3.18)$$

Sendo,

$$Y'_{rea,i}(r) = \frac{d}{dr} [Y_{rea,i}(r)] \quad (3.19)$$

A equação (3.18) pode ser re-escrita na seguinte forma:

$$\frac{d}{dr} [P_i(r)] + C_{0,i}(r) P_i(r) = C_{1,i}(r) + C_{2,i}(r) + C_{3,i}(r) \quad (3.20)$$

Sendo,

$$C_{0,i}(r) = \frac{Y'_{rea,i}(r) + F_{0v}}{Y_{rea,i}(r) + Y_{atr,i}} - \frac{3}{r} \quad (3.21)$$

$$C_{1,i}(r) = \frac{F_{0,i} P_{0,i}(r)}{M_i [Y_{rea,i}(r) + Y_{atr,i}]} \quad (3.22)$$

$$C_{2,i}(r) = \frac{R_{atr,i} P_{f,i}(r)}{M_i [Y_{rea,i}(r) + Y_{atr,i}]} \quad (3.23)$$

$$C_{3,i}(r) = \frac{-F_{e,i} P_{e,i}(r)}{M_i [Y_{rea,i}(r) + Y_{atr,i}]} \quad (3.24)$$

Onde $C_{1,i}(r)$, $C_{2,i}(r)$ e $C_{3,i}(r)$ representam os termos de geração devido à alimentação, atrito e elutriação. Como se assumiu que a sangria possui a mesma distribuição granulométrica do leito, seu termo de geração é incluído no coeficiente $C_{0,i}(r)$.

A equação (3.19) aplica-se a todo o particulado presente no reator, com uma restrição: o caso das partículas na faixa granulométrica dos finos gerados por atrito, que são assumidas não sofrerem encolhimento por atrito, e que também não sofrem encolhimento por reação química. Um balanço conservativo para estas partículas dentro do elemento $r \pm \Delta r/2$, para $0 < r < r_{f,i}$, sendo $r_{f,i}$ o máximo raio de uma partícula gerada por atrito, é dada por:

$$\begin{aligned}
& \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de} \\ \text{alimentação} \end{array} \right]_{r \pm \frac{\Delta r}{2}, i} - \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de} \\ \text{sangria} \end{array} \right]_{r \pm \frac{\Delta r}{2}, i} - \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de} \\ \text{elutriação} \end{array} \right]_{r \pm \frac{\Delta r}{2}, i} \\
& + \delta \left[r - (r_{f,i} - \Delta r) \right] \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de partículas vindo do} \\ \text{elemento superior devido} \\ \text{ao encolhimento} \end{array} \right]_{r_{f,i} - \frac{\Delta r}{2}, i} + \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de finos} \\ \text{gerados} \\ \text{por atrito} \end{array} \right]_{r \pm \frac{\Delta r}{2}, i} = 0
\end{aligned}$$

Na equação acima, $\delta \left[r - (r_{f,i} - \Delta r) \right]$ é uma função delta de Dirac, cuja integral resulta unitária para $r = r_{f,i} - \Delta r$ e nula para os demais raios.

Aplicando-se os mesmos procedimentos utilizados nos itens anteriores, tem-se que a função densidade de probabilidade da distribuição granulométrica das partículas não reativas e não atritáveis resulta:

$$\begin{aligned}
P_i(r) = & \frac{F_{0,i}}{F_{0v} M_i} P_{0,i}(r) + \frac{R_{atr,i}}{F_{0v} M_i} P_{f,i}(r) - \frac{F_{e,i}}{F_{0v} M_i} P_{e,i}(r) + \\
& - \frac{\delta \left[r - (r_{f,i} - \Delta r) \right] Y_{atr,i} P_i \left(r_{f,i} - \frac{\Delta r}{2} \right)}{F_{0v} \Delta r} \quad (3.25)
\end{aligned}$$

A equação (3.20) apresenta termos de geração devidos à alimentação, atrito e elutriação, que são definidos simultaneamente para todas as faixas granulométricas presentes no reator. Assim, convém desdobrar a função densidade de probabilidade em componentes devidas a cada um destes termos fontes, facilitando também a aplicação de condições de contorno. Assim, propõe-se:

$$P_i(r) = P_{1,i}(r) + P_{2,i}(r) + P_{3,i}(r) \quad (3.26)$$

Substituindo esta equação na equação (3.20), e considerando a teoria geral de solução de equações diferenciais lineares de primeira ordem (e.g. O'Neil, 1987), tem-se:

$$\frac{d}{dr} \left[M_i P_{1,i}(r) \right] + C_{0,i}(r) \left[M_i P_{1,i}(r) \right] = C_{1,i}(r) \quad (3.27)$$

$$\frac{d}{dr} \left[M_i P_{2,i}(r) \right] + C_{0,i}(r) \left[M_i P_{2,i}(r) \right] = C_{2,i}(r) \quad (3.28)$$

$$\frac{d}{dr} [M_i P_{3,i}(r)] + C_{0,i}(r) [M_i P_{3,i}(r)] = C_{3,i}(r) \quad (3.29)$$

Considera-se as seguintes condições de contorno:

$$P_{1,i}(r_{m,i}) = 0 \quad (3.30)$$

$$P_{2,i}(r_{f,i}) = 0 \quad (3.31)$$

$$P_{3,i}(r_{e,i}) = 0 \quad (3.32)$$

Aplicando também o desdobramento anterior à equação (3.25), para as partículas não sujeitas a encolhimento por reação química nem atrito, tem-se:

$$P_{1,i}(r) = \frac{F_{0,i}}{F_{0v} M_i} P_{0,i}(r) - \frac{\delta[r - (r_{f,i} - \Delta r)] Y_{atr,i} P_i(r_{f,i} - \Delta r/2)}{F_{0v} \Delta r} \quad (3.33)$$

$$P_{2,i}(r) = \frac{R_{atr,i}}{F_{0v} M_i} P_{f,i}(r) \quad (3.34)$$

$$P_{3,i}(r) = -\frac{F_{e,i}}{F_{0v} M_i} P_{e,i}(r) \quad (3.35)$$

Neste caso aproxima-se $P_i(r_{f,i} - \Delta r/2)$ por $P_i(r_{f,i})$, que é obtida da solução das equações diferenciais anteriores.

Uma condição adicional deve ser imposta e satisfeita para resolução do balanço populacional, que é a condição de normalização. Esta estabelece que para qualquer partícula sólida i presente no leito, a somatória de todas suas frações mássicas deve satisfazer a seguinte relação:

$$\int_0^{r_{m,i}} P_i(r^*) dr^* = 1 \quad (3.36)$$

3.2 Modelo de arraste e elutriação das partículas no reator

O modelo de arraste e elutriação é definido em duas etapas. Na primeira descreve-se o arraste de partículas do leito para o *freeboard* supondo que ela ocorra por dois mecanismos simultâneos: o arraste e elutriação direta das partículas da classe *critical fines*, e a ejeção de todo o espectro de particulado presente no leito devido a projeção da esteira de bolhas coalescendo e estourando na superfície do leito. Na segunda etapa descreve-se o arraste e elutriação das partículas das classes *smalls* e *larges* ao longo do *freeboard* através de um modelo proposto por Milioli (1991), baseado em duas características empíricas encontradas nestes tipos de reatores. A primeira destas características empíricas é que o fluxo ascendente de partículas ao longo do *freeboard* declina exponencialmente até determinada altura, denominada altura de desengajamento de transporte. Acima desta altura a concentração de partículas mantém-se constante e qualquer partícula que a ultrapasse é elutriada do reator (LEWIS, GILLILAND e LANG, 1962; BARACHOVCHIN, BEER e SAROFIM, 1981; WEN e CHEN, 1982; WALSH, MAYO e BEER, 1984; HORIO *et al.*, 1985; ANDERSSON e LECKNER, 1989); A segunda característica empírica refere-se à possibilidade de que partículas com velocidade terminal de queda livre superior a velocidade dos gases de arraste possam ser elutriadas, e inversamente, partículas com velocidade terminal menor que a velocidade dos gases de arraste possam retornar para o leito após serem ejetadas para o *freeboard*. (GELDART e POPE, 1983; WALSH, MAYO e BEER, 1984).

3.2.1 Arrasto das partículas do leito para o *freeboard*

Como mencionado, considera-se que o arraste de partículas do leito para o *freeboard* ocorra através de dois mecanismos agindo paralelamente e simultaneamente, os quais são:

- A. O arrasto e elutriação direta das partículas *critical fines*, sejam elas advindas da alimentação ou geradas por atrito;

- B. O mecanismo de ejeção da esteira de bolhas coalescendo e estourando na superfície do leito, a qual se torna responsável pelo arrasto de todo espectro de bitolas *small*s e *large*s presente no leito.

A. Arraste de partículas da classe *critical fines*

Para as partículas que possuem sua velocidade terminal de queda livre bem inferior a dos gases de arraste, chamadas neste trabalho de *critical fines*, assume-se as seguintes hipóteses e suposições:

- Considera-se que estas partículas sejam instantaneamente arrastadas e elutriadas do reator quando alimentadas ou geradas no seu interior;
- Adota-se que os finos gerados pelo atrito possuam uma distribuição granulométrica da partícula dada pela função de *Rosin-Rammler* (MERRICK e HIGHLEY, 1974; CHANDRAN e DUQUM, 1989; MILIOLI, 1991) e que esta classe de partículas não sofra os efeitos abrasivos entre partículas;
- Assume-se que todos os finos gerados por atrito estejam presentes na classe *critical fines* e que o máximo raio desta classe de particulado seja provido empiricamente;
- Na prática, a taxa de geração de finos devido ao atrito é superior a taxa de geração de finos devido ao encolhimento de partículas de bitolas superiores (MERRICK e HIGHLEY, 1974), sendo esta última taxa desprezada nos cálculos em vista da primeira;
- A concentração de *critical fines* no leito é considerada desprezível (BÉER, MASSIMILLA e SAROFIM, 1980; DONSI, MASSIMILLA e MICCIO, 1981; ARENA, D'AMORE e MASSIMILLA, 1983).

Usualmente, a taxa mássica de finos gerados por atrito é obtida experimentalmente através de um balanço mássico entre taxa de finos alimentados para o reator e os coletados em dispositivos de limpeza dos gases de exaustão (MERRICK e HIGHLEY, 1974; BÉER, MASSIMILLA e SAROFIM, 1980; DONSI, MASSIMILLA e MICCIO, 1981; ARENA, D'AMORE e MASSIMILLA, 1983). Então, o que é realmente medido é o efeito cumulativo de atrito e reação química. Desta forma, o termo devido ao encolhimento de partícula por

reação química presente em balanço de massa para determinação de taxas de arrasto de finos deve ser descartado. Assim, o seu fluxo mássico de *critical fines* arrastados do leito para o freeboard é dado como (MILIOLI, 1991):

$$F_{cri,i} = \frac{1}{A} \left[\int_0^{r_{cri,i}} F_{0,i} P_{0,i}(r) dr + \int_0^{r_{cri,i}} R_{atr,i} P_{f,i}(r) dr \right] \quad (3.37)$$

Sendo,

$F_{cri,i}$ Fluxo mássico de *critical fines* do sólido i arrastados e elutriados do reator, kg/m^2s .

A Área da seção transversal do leito, m^2 .

A função densidade de probabilidade de finos gerados por atrito do sólido i é representada pela distribuição de *Rosin Rammler* para a distribuição granulométrica

$$P_{f,i}(r) = 2n_i b_i (2r)^{n_i-1} \exp[-b_i (2r)^{n_i}] \quad (3.38)$$

Sendo,

b_i, n_i Coeficientes da distribuição *Rosin Rammler* para o sólido i , *adimensional*.

Medições experimentais (ARENA, D'AMORE e MASSIMILLA, 1983; DONSI, MASSIMILLA e MICCIO, 1981) suportam a validação desta consideração.

A distribuição granulométrica apresentada pela equação (3.38) fornece somente um perfil de tal distribuição, e por consequência, deve ser normalizada. Assim a função densidade de probabilidade da distribuição de finos gerados por atrito do sólido i , e utilizada nos cálculos, deve satisfazer a seguinte relação:

$$\int_0^{r_{f,i}} P_{f,i}(r^*) dr^* = 1 \quad (3.39)$$

A taxa mássica de finos gerados por atrito do sólido i é fornecida como (MERRICK e HIGHLEY, 1974):

$$R_{atrl,i} = k_{1,i} (U - U_{mf}) M_i \quad (3.40)$$

Sendo,

$k_{1,i}$ Coeficiente de taxa de atrito para espécie sólida i , $1/m$.

U Velocidade de fluidização, m/s .

U_{mf} Velocidade de mínima fluidização, m/s .

A função densidade de probabilidade da distribuição granulométrica de *critical fines* da espécie sólida i , $P_{cri,i}(r)$, é obtida das distribuições granulométricas de alimentação e geradas por atrito, ponderadas pela massa, e resulta:

$$P_{cri,i}(r) = \frac{1}{AF_{cri,i}} \left[P_{0,i}(r) \left(\frac{\int_0^{r_{cri,i}} F_{0,i} P_{0,i}(r) dr}{\int_0^{r_{cri,i}} P_{0,i}(r) dr} \right) + P_{f,i}(r) \left(\frac{\int_0^{r_{cri,i}} R_{atrl,i} P_{f,i}(r) dr}{\int_0^{r_{cri,i}} P_{f,i}(r) dr} \right) \right] \quad (3.41)$$

O fluxo mássico total de *critical fines* arrastadas do leito para o *freeboard* e posteriormente elutriadas é fornecido como:

$$F_{cri} = \sum_i^{N_{esp}} F_{cri,i} \quad (3.42)$$

Sendo,

F_{cri} Fluxo mássico de *critical fines* arrastados do leito para o *freeboard* e elutriados do reator, $kg/m^2 s$.

N_{esp} Número de espécies sólidas presente no leito, *adimensional*.

B. Arraste de partícula proveniente do estouro de bolhas

Nesta seção considera-se o mecanismo de ejeção de partículas provenientes da esteira de bolhas coalescendo e estourando na superfície do leito. As seguintes hipóteses e suposições são consideradas:

- Adota-se a teoria bifásica de fluidização na descrição hidrodinâmica das bolhas;
- Assume-se que somente bolhas coalescendo próximas da superfície do leito permitem ejeções significativas do particulado presente na esteira de bolhas (GEORGE e GRACE, 1978);
- Os sólidos ejetados por este mecanismo apresentam a mesma composição e distribuições granulométricas das espécies sólidas presentes no leito.

Tem-se, de acordo com a teoria bifásica de fluidização, que o fluxo volumétrico de bolhas atravessando o leito seja:

$$Q_B = A(U - U_{mf}) \quad (3.43)$$

Sendo,

Q_B Fluxo volumétrico de bolhas atravessando o leito, m^3/s .

Definindo que f_{est} seja a fração volumétrica da esteira de partículas no volume de bolha, tem-se que o fluxo volumétrico de esteira nas bolhas é dado como:

$$Q_{est} = f_{est} A(U - U_{mf}) \quad (3.44)$$

Sendo,

f_{est} Fração volumétrica da esteira de partículas nas bolhas atravessando o leito, *adimensional*.

Q_{est} Fluxo volumétrico da esteira de partículas nas bolhas atravessando o leito, m^3/s .

Considerando que, da teoria bifásica de fluidização, a densidade média do leito é dado por $\rho_p (1 - \varepsilon_{mf})$, e supondo-se que a fração de vazios na esteira de partículas presente nas bolhas seja o mesmo que da fase de particulado, obtém-se o fluxo mássico de partículas ejetadas para o *freeboard* provenientes da esteira de bolhas dado por:

$$F_{est} = f_{est} \xi_{ejet} \rho_p (1 - \varepsilon_{mf}) (U - U_{mf}) \quad (3.45)$$

Sendo,

F_{est} Fluxo mássico de partículas ejetadas do leito para o *freeboard* proveniente da esteira de bolhas, kg/m^2s .

ξ_{ejet} Relação entre o volume da esteira ejetado na superfície do leito pelo volume da esteira, *adimensional*.

ρ_p Densidade média das partículas do leito, kg/m^3 .

ε_{mf} Fração de vazios no leito no estado de mínima fluidização, *adimensional*.

A equação (3.45) responde pela ejeção da esteira de uma única bolha estourando na superfície do leito.

É conhecido que a coalescência de bolhas próximas a superfície do leito é o principal fenômeno causador da ejeção de particulado do leito para o *freeboard* (HATANO e ISHIDA, 1981; HATANO e ISHIDA, 1983; HATANO, OKUMA e ISHIDA, 1984). Briens, Bergougnou e Baron (1988) desenvolveram um modelo probabilístico para lidar com tal fenômeno, que posteriormente foi estendido por Baron *et al* (1990). Estes últimos autores propuseram que as bolhas tomam caminhos preferências ao longo de sua ascensão pelo leito, e como consequência, o tamanho das bolhas próximas da superfície do leito tende a ser maior que o suposto por Briens, Bergougnou e Baron (1988).

Hatano e Ishida (1983) propuseram que a distância entre duas bolhas consecutivas próximas da superfície do leito pode ser dada como uma distribuição gaussiana da seguinte forma:

$$f\left(\frac{\Delta l}{d_B}\right) = \left(\frac{1}{(2\pi\sigma)^{0.5}}\right) \exp\left[-\left(\frac{\Delta l - \Delta l_m}{\sigma d_B}\right)^2\right] \quad (3.46)$$

Sendo,

Δl Distância centro a centro entre duas bolhas consecutivas próximas da superfície do leito, *m*.

Δl_m Valor médio de Δl , *m*.

d_B Diâmetro da bolha na superfície do leito, *m*.

σ Desvio padrão, *adimensional*.

Adotando a proposta de Ishida, Nishiwaki e Shirai (1980), de que as bolhas no leito estejam uniformemente distribuídas na seção transversal do leito, a distância média entre bolhas resulta:

$$\Delta l_m = d_B \left(\frac{6\varepsilon_B}{\pi}\right)^{-1/3} \quad (3.47)$$

Sendo,

ε_B Fração volumétrica média ocupada pelas bolhas próximas da superfície do leito em relação ao volume do leito, *adimensional*.

De acordo com a teoria bifásica de fluidização tem-se que a fração volumétrica média das bolhas seja:

$$\varepsilon_B = \frac{U - U_{mf}}{U_B} \quad (3.48)$$

Sendo,

U_B Velocidade de ascensão de bolhas, *m/s*.

Levando-se em conta que as bolhas seguem trajetórias preferenciais ao longo do leito, tem-se que a fração volumétrica ocupada pelas bolhas próxima da superfície seja maior do

que a calculada pela equação (3.48). Baron et al . (1990) propuseram uma nova para o cálculo da distância média entre os centros de bolhas consecutivas próximas da superfície do leito, que é expressa como:

$$\Delta l_m = d_B \left(\frac{6\varepsilon'_B}{\pi} \right)^{-1/3} \quad (3.49)$$

Sendo,

ε'_B Fração volumétrica local das bolhas próximas da superfície do leito em relação ao volume do leito, *adimensional*.

Sendo a fração volumétrica local das bolhas próximas da superfície do leito dada como:

$$\varepsilon'_B = \frac{\varepsilon_B}{\alpha_B} \quad (3.50)$$

Sendo,

α_B Fração da área transversal do leito ocupada pelas trajetórias das bolhas próximas da superfície do leito, *adimensional*.

Baron et al (1990) correlacionaram esta fração em relação a altura do leito como:

$$\alpha_B = 1,74 \left(\frac{H_l}{\sqrt{A_0}} + 4 \right)^{-0,4} \quad (3.51)$$

Sendo,

H_l Altura do leito expandido, m.

A_0 Relação da área da seção transversal do leito associado por injetor, m^2 .

A probabilidade de duas bolhas coalescendo próximo da superfície do leito é fornecida por Clift e Grace (1971) como:

$$P = (1 - \cos \gamma) \int_{-\infty}^1 f\left(\frac{\Delta l}{d_B}\right) d\left(\frac{\Delta l}{d_B}\right) \quad (3.52)$$

Sendo,

P Probabilidade de coalescência de duas bolhas próximo da superfície do leito, *adimensional*.

γ Ângulo entre a direção de aproximação de duas bolhas e a vertical, *graus*.

Clift e Grace(1971) observam que a coalescência entre duas bolhas ocorre somente quando a distância entre seus centros torna-se inferior aos seus diâmetros, e quando o ângulo de aproximação entre elas e o eixo vertical seja menor que 30°.

Briens, Bergougnou e Baron (1988) consideram que o espaçamento entre duas bolhas consecutivas próximas da superfície do leito possa ser dado como independente do espaçamento das bolhas anteriores. Com isto a probabilidade de k bolhas coalescendo consecutivamente próximas da superfície do leito pode ser expressa como:

$$P_k = (1 - P) P_{k-1} \quad (3.53)$$

Sendo,

P_k Probabilidade de coalescência de k bolhas consecutivas próximo da superfície do leito, *adimensional*.

O fluxo mássico total de partículas ejetadas pelo coalescimento de n bolhas torna-se:

$$F_{est} = f_{est} \rho_p (1 - \varepsilon_{mf}) (U - U_{mf}) \sum_{k=2}^n [(k-1) \xi_{ejet,k} P_k] \quad (3.54)$$

Sendo,

n Número de coalescimento das bolhas, *adimensional*.

Nota-se nesta equação que a ejeção proveniente do estouro de bolhas individuais é desprezada por ser insignificante (GEORGE e GRACE, 1978).

Tem-se, a partir das hipóteses de um leito bem misturado e que as partículas presentes na esteira possuam a mesma distribuição granulométrica e composição das espécies sólidas presentes no leito, que o fluxo de partículas do sólido i arrastadas do leito para o *freeboard* proveniente do mecanismo de coalescimento e estouro das bolhas na superfície do leito é dado por:

$$F_{est,i} = F_{est} X_i \quad (3.55)$$

Sendo,

$F_{est,i}$ Fluxo mássico de partículas da espécie sólida i ejetadas para o *freeboard* e que sejam provenientes da esteira das bolhas, kg/m^2s .

X_i Fração mássica do sólido i no leito, *adimensional*.

Para avaliação do fluxo mássico total de partículas ejetadas dada pela equação (3.54), os valores de f_{est} e $\xi_{ejet,k}$ necessitam ser estabelecidos. Adota-se que o produto destas duas variáveis seja dado pela correlação proposta por Milioli (1991), obtida a partir de ajustes a dados empíricos de literatura:

$$f_{est} \xi_{ejet,k} = \begin{cases} 0,1 & \text{se } \frac{U}{U_{mf}} < 10 \\ 0,5 \left[1 - \exp \left(9,5 - \frac{U}{U_{mf}} \right) \right] & \text{se } \frac{U}{U_{mf}} \geq 10 \end{cases} \quad (3.56)$$

3.2.2 Modelo fenomenológico de arraste no *freeboard* e elutriação

Nesta seção apresenta-se o modelo fenomenológico de arraste e elutriação das partículas na região do *freeboard* proposto inicialmente por Milioli (1991), também descrito

em Milioli e Foster (1995b). As equações deste modelo, quando ajustadas a dados experimentais, permitem avaliar os fluxos mássicos de partículas ao longo do *freeboard* e elutriadas do reator. Também no desenvolvimento deste modelo as partículas são divididas em três categorias conforme a relação da sua velocidade de queda livre com a velocidade dos gases de arraste.

Na primeira categoria de partículas temos a classe *critical fines* que possuem velocidade terminal de queda livre bem inferior a velocidade dos gases de arraste, e por isso adota-se que sejam instantaneamente elutriadas. Na segunda categoria temos as partículas *smalls*, que também possuem velocidade terminal inferior a velocidade dos gases de arraste, porém com bitolas superiores as da primeira categoria. Na ultima categoria temos as partículas *larges* que possuem velocidade terminal superior a velocidade dos gases.

A partir destas definições, o máximo raio de uma partícula *smalls* da espécie sólida i $r_{div,i}$ é obtido pela comparação da velocidade média dos gases no *freeboard* com as velocidades terminais de queda livre, determinadas através de procedimento descrito por Geldart (1986b) (ver ANEXO A). O máximo raio de uma partícula da categoria *critical fines* $r_{cri,i}$ é determinado experimentalmente.

Com a hipótese de que as partículas da categoria *critical fines* sejam instantaneamente elutriadas quando alimentadas ou geradas no reator, as equações (3.37), (3.41) e (3.42) definem elutriação desta classe de particulado.

O modelo para arrasto e elutriação de *smalls* e *larges* baseia-se em duas observações empíricas (GELDART, 1986b): *i.* a concentração de particulado decai exponencialmente ao longo da altura do *freeboard*; *ii.* Algumas partículas com velocidade terminal superior à do gás são elutriadas e algumas partículas com velocidade terminal inferior à do gás retornam para o leito.

Para avaliação do fluxo mássico de arraste e elutriação de *smalls* e *larges* as seguintes hipóteses e considerações são adotadas:

- O fluxo mássico de partículas arrastadas do leito para o *freeboard* é obtido através das equações (3.54) a (3.56);

- Assume-se que toda partícula seja ejetada transversalmente a superfície do leito e a componente média de sua velocidade é dada pela equação (3.57), onde ζ_1 é um primeiro parâmetro do modelo e indica a relação entre a velocidade vertical da partícula ejetada e a velocidade de bolha no topo do leito. Fung e Hamdullapur (1993) sugerem que este valor seja ajustado entre 2 a 3. Neste trabalho, adota-se o valor médio de 2,5, como proposto por Pemberton e Davidson (1986);

$$U_p(0) = \zeta_1 U_B \quad (3.57)$$

Sendo,

$U_p(z)$ Velocidade vertical da partícula ejetada na superfície do leito,
m/s.

ζ_1 Relação entre a velocidade de ejeção da partícula e a velocidade de bolha no topo do leito, *adimensional*.

- Assume-se que o material ejetado da esteira das bolhas possua a mesma distribuição granulométrica e composição de espécies sólidas presente no leito;
- O particulado ejetado pelo mecanismo de estouro de bolhas é dividido em *smalls* e *larges*;
- A máxima altura de ascensão Z de uma partícula *larges* de tamanho médio é assumida ser a altura de desengajamento de transporte. Assume-se que qualquer partícula que ultrapasse este valor não retorne para o leito. Para avaliação desta altura utiliza-se do equacionamento proposto por Morsi e Alexander (1972) (ver ANEXO B).
- Assume-se que as partículas *larges* que não são elutriadas retornam para o leito arrastando uma proporção de partículas *smalls* em ascensão;
- Admite-se que a composição de espécies e a distribuição granulométrica de partículas *smalls* e *larges* em fluxo ascendente ou descendente no *freeboard* sejam invariantes.

Assume-se que o fluxo mássico de partículas *larges* do sólido *i* em ascensão ao longo da altura *z* do *freeboard*, medido a partir da superfície do leito, seja dado como:

$$F_{L+,i}(z) = F_{L+,i}(0) \exp\left[\frac{z}{Z} \ln(\zeta_2)\right] \quad (3.58)$$

Sendo,

$F_{L+,i}(z)$ Fluxo mássico ascendente de *larges* do sólido *i* ao longo da altura *z* do *freeboard*, $\text{kg/m}^2\text{s}$.

z Altura do *freeboard* medida a partir da superfície do leito, *m*.

Z Máxima altura alcançada no *freeboard* pela partícula *larges* de diâmetro médio do leito, *m*.

ζ_2 Fração residual de *larges* fluido além da altura de desencajamento de transporte, *adimensional*.

Na equação (3.58), ζ_2 é um parâmetro do modelo que governa o fluxo residual de partículas *larges* fluindo além da altura de desencajamento, sendo este o segundo parâmetro do modelo de arraste e elutriação, o qual deve ser ajustado através de dados experimentais.

Aplicando-se um balanço mássico de partículas *larges* ao longo da altura do *freeboard* encontramos que o fluxo descendente de *larges* da espécie sólida *i* é dado como:

$$F_{L-,i}(z) = F_{L+,i}(z) - F_{L+,i}(\lambda) \quad (3.59)$$

Sendo,

$F_{L-,i}(z)$ Fluxo mássico descendente de *larges* do sólido *i* ao longo da altura do *freeboard*, $\text{kg/m}^2\text{s}$.

λ Menor valor entre a altura de desencajamento *Z* e altura do *freeboard*, *m*.

Compondo as equações (3.58) na equação (3.59), encontra-se que o fluxo mássico descendente de *larges* do sólido *i* dado por:

$$F_{L-,i}(z) = F_{L+,i}(z) - F_{L+,i}(0) \exp\left[\frac{\lambda}{Z} \ln(\zeta_2)\right] \quad (3.60)$$

Considere-se o fluxo mássico de partículas *smalls* ao longo do *freeboard*. Supõe-se que o gradiente do fluxo mássico de *smalls* em ascensão para uma determinada espécie sólida *i* seja diretamente proporcional ao seu fluxo mássico e ao fluxo mássico total de *larges* em queda, ou seja:

$$\frac{d}{dz}[F_{S+,i}(z)] = -\zeta_3 F_{S+,i}(z) F_{L-}(z) \quad (3.61)$$

Sendo,

$F_{S+,i}(z)$ Fluxo mássico ascendente de *smalls* do sólido *i* ao longo da altura do *freeboard*, $\text{kg/m}^2\text{s}$

ζ_3 Coeficiente de transporte no *freeboard* que governa captura de *smalls* em fluxo ascendente pelo fluxo de *larges* descendente, ms/kg .

O fluxo mássico total de *larges* em queda é fornecido como:

$$F_{L-}(z) = \sum_{i=1}^{N_{\text{esp}}} F_{L-,i}(z) \quad (3.62)$$

Na equação (3.62), o coeficiente ζ_3 é o terceiro e último parâmetro do modelo de arraste e elutriação, o qual deve ser obtido também através de dados experimentais, e avalia a captura de partículas *smalls* de um determinado sólido *i* em ascensão pelo fluxo mássico total de *larges* em queda para o leito.

Substituindo as equações (3.60) e (3.62) na equação (3.61), e integrando ao longo de toda altura do *freeboard* obtém-se o fluxo mássico ascendente de *smalls* do sólido *i* em função da altura do *freeboard*:

$$F_{S+,i}(z) = F_{S+,i}(0) \exp\left[-\zeta_3 F_{L+}(0) a(z)\right] \quad (3.63)$$

Onde $a(z)$ é definido como:

$$a(z) = \left[z \frac{\exp\left(\frac{z}{Z} \ln \zeta_2\right) - 1}{\ln \zeta_2} - z \exp\left(\frac{\lambda}{Z} \ln \zeta_2\right) \right] \quad (3.64)$$

Logo, o fluxo mássico total de partículas *small*s e *large*s elutriadas devido ao mecanismo de estouro de bolhas na superfície do leito é dado como:

$$F(\lambda) = \sum_{i=1}^{N_{exp}} [F_{S+,i}(\lambda) + F_{L+,i}(\lambda)] \quad (3.65)$$

Sendo,

$F(\lambda)$ Fluxo mássico total de partículas elutriadas pela ejeção da esteira das bolhas, $kg/m^2.s$.

λ Menor valor entre a altura de desengajamento Z e a altura do *freeboard*, m .

As condições de contorno para solução do modelo de arraste e elutriação no *freeboard* para as categorias de partículas *small*s e *large*s da espécie sólida i são:

$$F_{S+,i}(0) = F_{est,i} \int_{r_{cri,i}}^{r_{div,i}} P_i(r) dr \quad (3.66)$$

$$F_{L+,i}(0) = F_{est,i} \int_{r_{div,i}}^{r_{m,i}} P_i(r) dr \quad (3.67)$$

Os fluxos mássicos totais de partículas *small*s e *large*s dado por este mesmo mecanismo são:

$$F_{S+}(0) = \sum_{i=1}^{N_{exp}} F_{S+,i}(0) \quad (3.68)$$

$$F_{L+}(0) = \sum_{i=1}^{N_{exp}} F_{L+,i}(0) \quad (3.69)$$

3.2.3 Taxa total de elutriação e distribuição granulométrica do elutriado

A taxa mássica total de partículas elutriadas para um determinado sólido i , que é dado pelo mecanismo de arraste e elutriação direta dos *critical fines*, e pelo mecanismo de projeção das esteiras de bolhas que explodem na superfície do leito, é dada como:

$$F_{e,i} = A \left[F_{cri,i} + F_{S+,i}(\lambda) + F_{L+,i}(\lambda) \right] \quad (3.70)$$

A distribuição granulométrica do elutriado para a espécie sólida i é obtida das distribuições granulométricas de *critical fines*, *smalls* e *larges*, ponderados pela massa, e resulta:

$$P_{e,i}(r) = P_{cri,i}(r) \left(\frac{AF_{cri,i}}{F_{e,i}} \right) + \frac{P_i(r)}{\int_{r_{cri,i}}^{r_{div,i}} P_i(r) dr} \left(\frac{AF_{S+,i}(\lambda)}{F_{e,i}} \right) + \frac{P_i(r)}{\int_{r_{div,i}}^{r_{m,i}} P_i(r) dr} \left(\frac{AF_{L+,i}(\lambda)}{F_{e,i}} \right) \quad (3.71)$$

3.3 Modelo matemático para determinação das concentrações gasosas

Em conjunto com os modelos matemáticos para determinação de distribuições granulométricas, arraste e elutriação, aplica-se modelagem para determinação das concentrações de gases ao longo do reator. Considera-se que o reator seja dividido em quatro regiões distintas denominadas de (1) região de jatos, (2) emulsão, (3) bolhas e (4) *freeboard*. Balanços mássicos conservativos são aplicados somente nas regiões de emulsão, bolhas e *freeboard*, enquanto supõe-se que a região de jatos seja formada por um bolsão de ar de pequena espessura na base do leito que alimenta as fases de emulsão e bolhas.

A Figura 3.3 apresenta as interações em termos de trocas gasosas possíveis entre as regiões do reator:

Figura 3.3 - Ilustração das possíveis trocas gasosas entre as regiões do reator.

3.3.1 Região de jatos

A região de jatos é tratada como a região de entrada dos gases na fase de emulsão e de bolhas e as seguintes hipóteses e considerações são adotadas:

- Considera-se que os injetores são do tipo *stand-pipe* com jatos transversais. Admite-se que os jatos formem um colchão de ar de pequena espessura na base do leito e distribuído por toda seção transversal, o qual supre os gases de alimentação para as fases de emulsão e bolhas;

- A região de jatos é assumida ser uniforme e bem distribuída. As concentrações das espécies gasosas nesta região são consideradas constantes e iguais as do ar de alimentação;
- Assume-se que nesta região não ocorram reações químicas e presença de particulado;
- O único fluxo de massa entrando na região de jatos é aquele proveniente da alimentação de ar para o reator. Todo gás entrando na fase de emulsão e bolhas é proveniente da região de jatos, exceto pelas trocas interfásicas ocorrendo entre emulsão e bolhas. De toda vazão de ar suprida pela região de jatos, a fração necessária para a mínima fluidização flui para a região de emulsão, enquanto o excedente flui para a fase de bolhas.

3.3.2 Região de bolha

Na fase de bolhas as seguintes hipóteses são assumidas:

- O gás nas bolhas flui em *plug flow*;
- Não há partículas sólidas nas bolhas;
- Assume-se que o excesso de gás em relação ao necessário para o estado de mínima fluidização flui para a fase de bolhas;
- A descarga de gás nas bolhas é variável devido a trocas gasosas com a emulsão. A seção transversal ao escoamento e a velocidade do gás na fase de bolhas variam em função destas trocas gasosas.

Um balanço mássico para a espécie de gás i no elemento de bolha $A_B \Delta z$, como ilustrado na Figura 3.4, é expresso como:

Figura 3.4 - Esquema ilustrativo de um elemento de volume na fase de bolhas.

$$\begin{aligned}
 & \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de acúmulo} \\ \text{de} \\ i \text{ no elemento} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{Descarga de } i \text{ entrando} \\ \text{no elemento} \\ \text{pela base} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Descarga de } i \text{ saindo} \\ \text{do elemento} \\ \text{pelo topo} \end{array} \right] \\
 & \quad \text{[I]} \qquad \qquad \qquad \text{[II]} \qquad \qquad \qquad \text{[III]} \\
 & \quad - \left[\begin{array}{c} \text{Troca de } i \text{ pelas bordas} \\ \text{com} \\ \text{a emulsão} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de produção ou redução} \\ \text{de } i \text{ por reação química} \\ \text{no elemento} \end{array} \right] \\
 & \qquad \qquad \qquad \text{[IV]} \qquad \qquad \qquad \text{[VI]}
 \end{aligned}$$

Desenvolvendo cada termo da relação acima separadamente temos:

A. Taxa de acúmulo de i no elemento

A taxa de acumulação da espécie gasosa i no elemento é dada como:

$$\text{[I]} \equiv \frac{\partial}{\partial t} [A_B \Delta z C_{B,i}(z)] \quad (3.72)$$

Sendo,

A_B Área da seção transversal do leito ocupada por bolhas, m^2 .

$C_{B,i}(z)$ Concentração molar da espécie gasosa i na fase de bolhas ao longo da altura do leito, $kmol/m^3$.

B. Descarga de i entrando e saindo, respectivamente, pela base e topo do elemento

A descarga de i entrando [II] e saindo [III], respectivamente, pela base e topo do elemento da fase de bolhas é dada como:

$$[II]-[III] \equiv \left[N_{B,i} A_B \Big|_z - N_{B,i} A_B \Big|_{z+\Delta z} \right] \quad (3.73)$$

Sendo,

$N_{B,i}$ Fluxo molar da espécie gasosa i na fase de bolhas, $kmol/m^2s$.

O fluxo molar $N_{B,i}$ é por:

$$N_{B,i} = U_B C_{B,i}(z) - D_{B,i} \frac{\partial}{\partial z} [C_{B,i}(z)] \quad (3.74)$$

Sendo,

$D_{B,i}$ Coeficiente de difusão mássica do gás i na fase de bolhas, m^2/s .

U_B Velocidade de ascensão de bolhas ou do gás em *plug flow* na fase de bolhas, m/s .

Na equação (3.74), o primeiro termo a direita representa convecção molar, enquanto o segundo representa a difusão molar dada pela lei de *Fick*.

C. Trocas gasosas de i entre o elemento de bolha e emulsão

A troca da espécie gasosa i entre o elemento da fase de bolhas e a emulsão é fornecida como:

$$[IV] \equiv (A_B \Delta z) K_{BE,i} [C_{B,i}(z) - \bar{C}_{E,i}] \quad (3.75)$$

Sendo,

$K_{BE,i}$ Coeficiente de troca de massa de um gás i entre bolha e emulsão (difusão+convecção), l/s .

$\bar{C}_{E,i}$ Concentração molar média da espécie gasosa i na emulsão, $kmol/m^3$.

D. Taxa de produção ou consumo de i no elemento da fase de bolhas

A taxa de produção ou consumo da espécie gasosa i por reação química no elemento da fase de bolhas é dado como:

$$[V] \equiv \sum_{j=1}^{M_{esp}} (\alpha_{j,i} r_{B,j} A_B \Delta z) \quad (3.76)$$

Sendo,

M_{esp} Número de espécies gasosas analisadas ou de interesse, *adimensional*.

$\alpha_{j,i}$ Coeficiente estequiométrico de formação ou consumo do gás i através de reação química j , *adimensional*.

$r_{B,j}$ Taxa da reação química j na fase de bolhas, $kmol/m^3 s$.

E. Balanço conservativo da espécie de gás i no elemento da fase de bolhas

Reunindo todos os termos de [I] a [V] utilizados no balanço do elemento de bolhas, ou seja, as equações (3.72), (3.73), (3.75) e (3.76) obtemos a seguinte equação:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [A_B C_{B,i}(z)] &= \frac{[N_{B,i} A_B]_z - [N_{B,i} A_B]_{z+\Delta z}}{\Delta z} + \\ &- A_B K_{BE,i} [C_{B,i}(z) - \bar{C}_{E,i}] + A_B \sum_{j=1}^{M_{esp}} \alpha_{j,i} r_{B,j} \end{aligned} \quad (3.77)$$

Substituindo a equação (3.74) na equação (3.77), aplicando a hipótese de regime permanente e levando ao limite quando Δz tendendo a zero, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \left[A_B U_B C_{B,i}(z) \right] = \frac{d}{dz} \left[A_B D_{B,i} \frac{d}{dz} C_{B,i}(z) \right] + \\ -A_B K_{BE,i} \left[C_{B,i}(z) - \bar{C}_{E,i} \right] + A_B \sum_{j=1}^{M_{esp}} \alpha_{j,i} r_{B,j} \end{aligned} \quad (3.78)$$

As condições de contorno para resolução da equação (3.78) são:

$$\left\{ \begin{array}{l} C_{B,i}(0) = C_{0,i} \\ \frac{d}{dz} C_{B,i}(H_l) = 0 \end{array} \right. \quad (3.79)$$

3.3.3 Região da emulsão

As seguintes hipóteses e suposições são aplicadas no balanço conservativo para a fase de emulsão:

- A fase de emulsão está permanentemente no estado de mínima fluidização;
- A emulsão está bem misturada na direção axial, de forma que não ocorrem gradientes de concentração ao longo da altura do leito;
- As trocas de gases entre bolhas e emulsão são uniformemente distribuídas na seção transversal do reator;
- Há gradientes transversais de concentrações de gases na emulsão, os quais são intensificados devido à posição de alimentação dos sólidos. O transporte de massa na seção transversal da emulsão é dominado por dispersão turbulenta;
- A emulsão é homogênea no que se refere às concentrações de sólidos;
- Todo gás que entra na fase de emulsão provém da região de jatos e das trocas gasosas com a fase de bolhas;

- Os gases gerados por reação química fluem para a fase de bolhas e para o *freeboard*. Admite-se que a área da seção transversal e a velocidade dos gases da emulsão mantêm-se constantes;
- A emulsão é considerada um corpo homogêneo no que se refere às distribuições de partículas sólidas estando sempre na altura de mínima fluidização e sem a presença de bolhas;
- Termos fontes na seção transversal respondem pelas trocas de gases entre a emulsão e bolhas;
- Os perfis transversais de concentrações de gases a serem determinados referem-se à fração de tempo em que um ponto geométrico do espaço do reator esta ocupado pela emulsão.

Um balanço mássico para a espécie gasosa i no elemento da emulsão $H_{mf} \Delta A$, como apresentado na Figura 3.5, é expresso como:

Figura 3.5 - Esquema ilustrativo de um elemento de volume na fase de emulsão.

$$\begin{aligned}
& \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de acúmulo} \\ \text{de} \\ i \text{ no elemento} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{Descarga de } i \text{ entrando} \\ \text{no elemento através} \\ \text{das trocas com} \\ \text{elementos vizinhos} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Descarga de } i \text{ saindo} \\ \text{do elemento através} \\ \text{das trocas com} \\ \text{elementos vizinhos} \end{array} \right] + \\
& \quad \text{[I]} \qquad \qquad \qquad \text{[II]} \qquad \qquad \qquad \text{[III]} \\
& + \left[\begin{array}{c} \text{Descarga de } i \\ \text{entrando no elemento} \\ \text{pela base (jatos)} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Descarga de } i \\ \text{saindo do elemento} \\ \text{pelo topo (freeboard)} \end{array} \right] + \\
& \quad \qquad \qquad \text{[IV]} \qquad \qquad \qquad \text{[V]} \\
& + \left[\begin{array}{c} \text{Trocas de } i \\ \text{com} \\ \text{a fase de bolhas} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de produção} \\ \text{ou consumo de } i \text{ por} \\ \text{reação química.} \end{array} \right] \\
& \qquad \qquad \qquad \text{[VI]} \qquad \qquad \qquad \text{[VII]}
\end{aligned}$$

Como realizado para a fase de bolhas, cada termo acima é desenvolvido separadamente e o balanço conservativo da espécie gasosa i no elemento da fase de emulsão torna-se a junção de todos.

A. Taxa de acúmulo de i no elemento

A taxa de acumulação da espécie gasosa i no elemento da fase de emulsão é dada como:

$$\text{[I]} \equiv \frac{\partial}{\partial t} \left[\varepsilon_{mf} H_{mf} \Delta A C_{E,i}(x, y) \right] \quad (3.80)$$

Sendo,

H_{mf} Altura do leito no estado de mínima fluidização, m .

$C_{E,i}(x, y)$ Concentração molar da espécie gasosa i na emulsão na coordenada (x, y) , $kmol/m^3$.

Sendo o volume de gás no elemento da fase de emulsão dado como $\varepsilon_{mf} H_{mf} \Delta A$.

B. Descargas de i entrando e saindo do elemento devido a trocas com elementos vizinhos

As descargas de i entrando [II] e saindo [III] do elemento da fase de emulsão devido às trocas gasosas com os elementos vizinhos, nas direções x e y são, dados como:

$$\begin{aligned} [\text{II}]-[\text{III}] \equiv & \left[N_{E,i} \epsilon_{mf} H_{mf} \Delta y \right]_x - \left[N_{E,i} \epsilon_{mf} H_{mf} \Delta y \right]_{x+\Delta x} + \\ & + \left[N_{E,i} \epsilon_{mf} H_{mf} \Delta x \right]_y - \left[N_{E,i} \epsilon_{mf} H_{mf} \Delta x \right]_{y+\Delta y} \end{aligned} \quad (3.81)$$

Sendo,

$N_{E,i}$ Fluxo molar da espécie gasosa i na emulsão, $kmol/m^2 s$.

Pela hipótese do transporte de massa na seção transversal da emulsão dominado por difusão turbulenta, e em analogia a lei de *Fick*, têm-se:

$$N_{E,i} \Big|_x = -D_{E,i} \frac{\partial}{\partial x} [C_{E,i}(x, y)] \quad (3.82)$$

$$N_{E,i} \Big|_y = -D_{E,i} \frac{\partial}{\partial y} [C_{E,i}(x, y)] \quad (3.83)$$

Sendo,

$D_{E,i}$ Coeficiente de difusão turbulenta do gás i na emulsão, m^2/s .

C. Descargas de i entrando no elemento pela base

O fluxo de gás i que adentra o elemento de emulsão proveniente da região de jatos é dado como:

$$[\text{IV}] \equiv [U_{mf} \Delta A C_{0,i}] \quad (3.84)$$

D. Descargas de i saindo do elemento pelo topo

O fluxo do gás i saindo do elemento de emulsão pelo topo, isto é, saindo da emulsão para o *freeboard*, é fornecido por:

$$[V] \equiv [U_{mf} \Delta A C_{E,i}(x, y)] \quad (3.85)$$

F. Trocas gasosas de i entre o elemento da emulsão e a fase de bolhas

A troca gasosa da espécie de gás i ocorrendo entre o elemento de emulsão e a fase de bolhas é dada como:

$$[VI] \equiv \frac{\Delta A}{A} \left[\int_0^{H_l} A_B K_{BE,i} [C_{B,i}(z) - C_{E,i}(x, y)] dz \right] \quad (3.86)$$

G. Taxa de produção ou consumo de i no elemento de emulsão

A taxa de produção ou consumo da espécie gasosa i por reação química no elemento de emulsão é apresentado como:

$$[VII] \equiv \sum_{j=1}^{M_{sp}} (\alpha_{j,i} r_{E,j} \varepsilon_{mf} H_{mf} \Delta A) \quad (3.87)$$

Sendo,

$r_{E,j}$ Taxa da reação química j na fase de emulsão, $kmol/m^3s$.

H. Balanço conservativo da espécie de gás i no elemento de emulsão

Reagrupando todos os termos de [I] a [VII] utilizados no balanço conservativo do elemento de emulsão, as equações (3.80), (3.81), (3.84) a (3.87), obtemos a seguinte equação:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} [C_{E,i}(x, y)] &= \frac{[N_{E,i}]_x - [N_{E,i}]_{x+\Delta x}}{\Delta x} + \frac{[N_{E,i}]_y - [N_{E,i}]_{y+\Delta y}}{\Delta y} + \\
&+ \frac{U_{mf}}{\varepsilon_{mf} H_{mf}} C_{0,i} - \frac{U_{mf}}{\varepsilon_{mf} H_{mf}} C_{E,i}(x, y) + \\
&+ \frac{1}{A \varepsilon_{mf} H_{mf}} \left[\int_0^{H_l} A_B K_{BE,i} C_{B,i}(z) dz - \int_0^{H_l} A_B K_{BE,i} C_{E,i}(x, y) dz \right] + \\
&+ \sum_{j=1}^{M_{esp}} \alpha_{j,i} r_{E,j}
\end{aligned} \tag{3.88}$$

Aplicando-se a hipótese de um reator em regime permanente e levando ao limite quando Δx e Δy tendem a zero, temos que a equação (3.88) é reescrita com o auxílio das equações (3.82) e (3.83) como:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x} \left[D_{E,i} \frac{\partial}{\partial x} C_{E,i}(x, y) \right] &+ \frac{\partial}{\partial y} \left[D_{E,i} \frac{\partial}{\partial y} C_{E,i}(x, y) \right] + \\
&- \frac{1}{\varepsilon_{mf} H_{mf}} \left[\frac{1}{A} \int_0^{H_l} A_B K_{BE,i} dz + U_{mf} \right] C_{E,i}(x, y) = - \frac{U_{mf}}{\varepsilon_{mf} H_{mf}} C_{0,i} + \\
&- \frac{1}{\varepsilon_{mf} H_{mf}} \left[\frac{1}{A} \int_0^{H_l} A_B K_{BE,i} C_{B,i}(z) dz \right] + \sum_{j=1}^{M_{esp}} \alpha_{j,i} r_{E,j}
\end{aligned} \tag{3.89}$$

Como condições de contorno para resolução da equação (3.89), assume-se:

$$\frac{\partial}{\partial x} C_{E,i}(\text{paredes}) = \frac{\partial}{\partial y} C_{E,i}(\text{paredes}) = 0 \tag{3.90}$$

3.3.4 Região do *freeboard*

As seguintes hipóteses e suposições são aplicadas no balanço conservativo para a região do *freeboard*:

- O *freeboard* é uma região de transporte de gás/particulado onde se supõe que os sólidos estão homogeneamente distribuídos na seção transversal;
- O fluxo dos gases ocorre em *plug flow*.

Um balanço mássico da espécie gasosa i num elemento de *freeboard* $A_F \Delta z$, como mostrado na Figura 3.6, é expresso como:

Figura 3.6 - Esquema ilustrativo do elemento de freeboard.

$$\begin{aligned}
 \text{[I]} \quad \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de acúmulo} \\ \text{de} \\ i \text{ no elemento} \end{array} \right] &= \text{[II]} \quad \left[\begin{array}{c} \text{Descarga de } i \\ \text{entrando no elemento} \\ \text{pela base} \end{array} \right] - \text{[III]} \quad \left[\begin{array}{c} \text{Descarga de } i \\ \text{saindo do elemento} \\ \text{pelo topo} \end{array} \right] \\
 &+ \text{[IV]} \quad \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de produção} \\ \text{ou consumo de } i \text{ por} \\ \text{reação química.} \end{array} \right]
 \end{aligned}$$

Como feito nos balanços anteriores, cada termo é desenvolvido separadamente e o balanço conservativo da espécie gasosa i no elemento de *freeboard* é dado pela junção de todos.

A. Taxa de acúmulo de i no elemento

A taxa de acúmulo da espécie gasosa i no elemento de *freeboard* é dada como:

$$[I] \equiv \frac{\partial}{\partial t} [A \varepsilon_f \Delta z C_{F,i}(z)] \quad (3.91)$$

Sendo,

ε_f Fração de vazio no *freeboard*, *adimensional*.

$C_{F,i}(z)$ Concentração molar da espécie gasosa i no *freeboard* na altura z , $kmol/m^3$.

B. Descarga de i entrando e saindo do elemento

As descargas de i entrando [II] e saindo [III], respectivamente, pela base e topo do elemento de *freeboard* são fornecidos como:

$$[II] - [III] \equiv [N_{F,i} \varepsilon_f A]_z - [N_{F,i} \varepsilon_f A]_{z+\Delta z} \quad (3.92)$$

Sendo,

$N_{F,i}$ Fluxo molar da espécie gasosa i no *freeboard*, $kmol/m^2s$.

E a vazão molar da espécie gasosa i é dada como:

$$N_{F,i} \varepsilon_f A = U_F A C_{F,i}(z) - D_{F,i} \varepsilon_f A \frac{\partial}{\partial z} [C_{F,i}(z)] \quad (3.93)$$

Sendo,

U_F Velocidade dos gases no *freeboard*, m/s.

$D_{F,i}$ Coeficiente de difusão mássica do gás i no *freeboard*, m^2/s .

C. Taxa de produção ou consumo de i no elemento de *freeboard*.

A taxa de produção ou consumo da espécie gasosa i por reação química no elemento de *freeboard* é fornecido como:

$$[IV] \equiv \sum_{j=1}^{M_{esp}} (\alpha_{j,i} r_{F,j} \epsilon_f A \Delta z) \quad (3.94)$$

Sendo,

$r_{F,j}$ Taxa da reação química j no *freeboard*, $kmol/m^3 s$.

D. Balanço conservativo da espécie de gás i no elemento de *freeboard*.

Reagrupando todos os termos de [I] a [IV], ou seja, equações (3.91), (3.92) e (3.94), obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t} [A \epsilon_f \Delta z C_{F,i}(z)] = \frac{[N_{F,i} \epsilon_f A]_z - [N_{F,i} \epsilon_f A]_{z+\Delta z}}{\Delta z} + \sum_{j=1}^{M_{esp}} (\alpha_{j,i} r_{F,j} \epsilon_f A \Delta z) \quad (3.95)$$

Considerando-se o reator em regime permanente e levando ao limite quando Δz tende a zero, temos que a equação (3.95) é reescrita com o auxílio da equação (3.93) como:

$$\frac{d}{dz} [U_F C_{F,i}(z)] = \frac{d}{dz} \left[D_{F,i} \epsilon_f \frac{d}{dz} C_{F,i}(z) \right] + \epsilon_f \sum_{j=1}^{M_{esp}} \alpha_{j,i} r_{F,j} \quad (3.96)$$

As condições de contorno para resolução da equação (3.96) são:

$$\left\{ \begin{array}{l} C_{F,i}(0) = \frac{U_{mf} \bar{C}_{E,i} + (U - U_{mf}) C_{B,i}(H_l)}{U} \\ \frac{d}{dz} C_{F,i}(H_f) = 0 \end{array} \right. \quad (3.97)$$

3.4 Principais correlações e parâmetros gerais

A solução das equações conservativas da distribuição granulométrica do particulado, das concentrações gasosas ao longo do reator e do modelo de arraste e elutriação, requer o uso de correlações empíricas e semiempíricas que descrevam parâmetros associados à hidrodinâmica do leito e ao transporte de massa no meio fluidizado, as quais são apresentadas nesta secção.

3.4.1 Parâmetros gerais relacionados à hidrodinâmica do leito

A velocidade de mínima fluidização é dada por Wen e Yu (1996a) como:

$$U_{mf} = \frac{\mu_g}{2\rho_g r} \left[(1135,7 + Ar)^{0,5} - 33,7 \right] \quad (3.98)$$

Sendo,

μ_g Viscosidade aparente do ar no leito, kg/ms .

ρ_g Densidade dos gases no leito, kg/m^3 .

Ar Número de *Archimedes*, *adimensional*.

$\bar{r}$ Raio médio das partículas no leito, m .

Pagliuso (1994) propõe a seguinte correlação para a viscosidade do ar:

$$\mu_g = 3,632 \cdot 10^{-8} T_l + 7,895392 \cdot 10^{-6} \quad (3.99)$$

Sendo,

T_l Temperatura do leito, K .

Onde o número de Archimedes é dado como:

$$Ar = \frac{8 \rho_g^{-3} (\bar{\rho}_p - \rho_g) g}{\mu_g} \quad (3.100)$$

Sendo,

g Aceleração da gravidade, m/s^2 .

$\bar{\rho}_p$ Densidade média das partículas no leito, kg/m^3 .

A altura do leito nas condições de mínima fluidização é fornecida através de um balanço volumétrico do leito apresentada por Geldart (1986a) como:

$$H_{mf} = \frac{M}{\bar{\rho}_p A (1 - \varepsilon_{mf})} \quad (3.101)$$

Para a fração de vazios no estado de mínima fluidização, propõe-se a partir das equações fornecidas por Wen e Yu (1966a) que esta possa ser correlacionada através da esfericidade das partículas no leito da seguinte forma:

$$\varepsilon_{mf} \approx 1 - \left(\frac{11}{14} \right) \phi_p \quad (3.102)$$

Sendo,

ϕ_p Esfericidade média das partículas, *adimensional*.

O diâmetro das bolhas ao longo da altura do leito é dado pela correlação de Darton et al . (1977) sendo os coeficientes desta equação os mesmos apresentados por Stubington,

Barret e Lowry (1984) para temperaturas maiores que 573K , dada através da seguinte equação:

$$d_B(h) = \frac{0,430(U - U_{mf})^{0,4} (h + 0,1272)^{0,8}}{g^{0,2}} \quad (3.103)$$

Sendo,

h Altura ao longo do leito acima do distribuidor, m .

A velocidade de ascensão das bolhas ao longo do leito é dada por Xavier, Lewis e Davidson (1978) como:

$$U_B(h) = U - U_{mf} + 0,71[g d_B(h)]^{0,5} \quad (3.104)$$

Durante a ascensão e coalescimento das bolhas em reatores de leito fluidizado, as mesmas podem colapsar devido ao crescimento. Assume-se que o máximo tamanho estável de uma bolha em ascensão seja dado pela correlação proposta por Davidson e Harrison (1963):

$$d_{B\max} = \frac{2\bar{U}_t^2}{g} \quad (3.105)$$

Sendo,

$\bar{U}_t$ Velocidade terminal de queda livre da partícula de tamanho médio do leito, m/s .

Clift (1986) observa que melhores predições da correlação proposta por Davidson e Harrison (1963) ocorrem com o uso de uma velocidade terminal para tamanho de partícula 2,7 vezes maior que a bitola média das partículas no leito. Este procedimento é adotado pelo modelo.

3.4.2 Coeficientes de transporte de massa

O número de *Sherwood*, para aplicações em reatores de leito fluidizado, é um coeficiente adimensional de difusão de gases na emulsão, e estabelecido pela relação entre o coeficiente de difusão efetivo nos gases na emulsão e o coeficiente de difusão molecular em gases dada através da seguinte relação:

$$Sh = \frac{2E}{D_g} \quad (3.106)$$

Sendo,

D_g Coeficiente de difusão molecular gás/gás, m^2/s .

E Coeficiente de difusão efetivo dos gases na emulsão, m^2/s .

Sh Número de *Sherwood*, *adimensional*.

Considera-se o coeficiente de difusão molecular dos gases como definido em Field *et al.* (1967):

$$D_g = 2,17 \cdot 10^{-4} \left(\frac{T_l}{1200} \right)^{1,75} \quad (3.107)$$

La Nauze e Jung (1982) propuseram a seguinte correlação para avaliar o número de *Sherwood* para um combustor de carvão em de leito fluidizado:

$$Sh = 2\varepsilon + 0,69 \left(\frac{Re_r}{\varepsilon} \right)^{0,5} Sc^{1/3} \quad (3.108)$$

Sendo,

ε Fração de vazios no leito, *adimensional*.

Re_r Número de *Reynolds* da partícula de tamanho médio no leito, *adimensional*.

Sc Número de *Schmidt*, *adimensional*.

O número de *Reynolds* da partícula de tamanho médio no leito é dado como:

$$Re_r = \frac{2\bar{r}\rho_g U}{\mu_g} \quad (3.109)$$

Enquanto o número de *Schmidt* é definido como:

$$Sc = \frac{\mu_g}{\rho_g D_g} \quad (3.110)$$

Para avaliação da fração de vazios no leito, necessário nos cálculos da equação (3.108), adota-se a correlação proposta por Wen e Yu (1996b):

$$\varepsilon = \left(\frac{18 Re_r + 2,7 Re_r^{1,687}}{Ar} \right)^{0,213} \quad (3.111)$$

O fator de fluxo bolha/emulsão é um coeficiente de transporte de massa adimensional entre as fases de bolhas e emulsão, e que representa a quantidade de vezes que o volume de uma bolha é renovado no seu movimento ascendente através do leito. Davidson e Harrison (1963) propõem que o fator de fluxo seja dado como:

$$\chi = \frac{K_{BE} H_l}{\bar{U}_B} = \frac{6,34 H_{mf}}{d_B (g d_B)^{0,5}} \left(U_{mf} + \frac{1,3 \varepsilon_{mf} D_g^{0,5} g^{0,25}}{(1 + \varepsilon_{mf}) d_B^{0,25}} \right) \quad (3.112)$$

Sendo,

$\bar{U}_B$ Velocidade média de ascensão das bolhas, *m/s*.

χ Fator de fluxo bolha/emulsão, *adimensional*.

CAPITULO 4 - MODELO MATEMÁTICO FENOMENOLÓGICO DA ABFBC¹⁰ DE CARVÃO MINERAL COM ALTO TEOR DE CINZA E DESSULFURAÇÃO POR CALCÁRIO

Neste capítulo são apresentadas as equações do modelo adaptados para a combustão em leito fluidizado atmosférico borbulhante de carvões minerais com altos teores de cinzas e absorção de enxofre por calcário.

4.1 Introdução

O modelo para obtenção da distribuição granulométrica do particulado apresentado no capítulo anterior foi desenvolvido por Milioli (1991). Este modelo foi construído inicialmente para espécies sólidas sujeitas a redução ou encolhimento de bitola pelos efeitos simultâneos das reações químicas heterogêneas na superfície da partícula e de abrasão entre partículas. Este é o caso dos carvões minerais com baixos teores de cinzas, que comportam de acordo com o modelo de encolhimento *shrinking particle*.

Em nova versão, desenvolvida por Milioli (1998), o tratamento foi estendido para partículas de carvão com altos teores de cinzas. Neste caso, o núcleo carbonáceo ou de carvão seco devolatilizado sofre os efeitos de encolhimento apenas pelas reações químicas heterogêneas no interior da partícula de carvão de acordo com o modelo *shrinking core*. A casca externa da partícula, composta por uma rígida camada de cinzas reagidas e aderida ao núcleo não reagido, sofre apenas aos efeitos abrasivos entre as partículas e seu encolhimento é bem descrito pelo modelo *shrinking particle*. Para as partículas de calcário, as reações químicas não provocam modificações significativas de bitola, que ocorrem apenas por atrito. Neste caso, o modelo de encolhimento também é o *shrinking particle*.

¹⁰ ABFBC-Atmospheric Bubbling Fluidized Bed Combustion (combustão em leito fluidizado atmosférico borbulhante)

Na aplicação do modelo fenomenológico de arraste elutriação, ressalvas são feitas para as partículas de carvão. Supõe-se que não ocorra arraste ou elutriação direta dos núcleos carbonáceos, exceto aqueles advindos da alimentação e pertencentes à faixa granulométrica dos *critical fines*. Entretanto, as partículas de cinzas no leito possuem núcleos de carvão, e a sua elutriação também representa a elutriação destes núcleos. Neste caso, assume-se a mesma probabilidade condicional, no leito e no elutriado, de uma partícula de cinza conter um determinado núcleo de carvão.

Para as diferentes espécies sólidas consideradas utiliza-se a seguinte simbologia de subscritos:

a	Cinzas;
c	Núcleos carbonáceos;
$c+a$	Partículas de carvão;
l	Calcários.

Os modelos para concentrações gasosas ao longo do reator são aplicados apenas para as espécies gasosas O_2 e SO_2 . As distribuições de concentrações destas espécies permitem uma análise inicial do processo de combustão e absorção por calcário. Em etapas futuras outras espécies de gases serão incluídas. Assume-se em uma primeira aproximação que não ocorram reações químicas na fase de bolhas. No APÊNDICE A apresenta-se os equacionamentos para as reações heterogêneas do carbono fixo no interior da partícula de carvão e da absorção do enxofre pelas partículas de calcário.

4.2 Equações do modelo fenomenológico

4.2.1 Equações das distribuições granulométricas do particulado

As equações das distribuições granulométricas do particulado fornecidas pelas equações (3.18) e (3.25) são aqui apresentadas para cada sólido como:

Núcleos carbonáceos:

Para $0 \leq r \leq r_{m,c}$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} [P_c(r)] + \left[\frac{Y'_{rea,c}(r) + F_{0v}}{Y_{rea,c}(r)} - \frac{3}{r} \right] P_c(r) = + \\ + F_{0,c} \frac{P_{0,c}(r)}{M_c Y_{rea,c}(r)} - F_{e,c} \frac{P_{e,c}(r)}{M_c Y_{rea,c}(r)} \end{aligned} \quad (4.1)$$

A taxa de reação de um núcleo carbonáceo de raio l contido em uma partícula de carvão de raio externo r é dada como:

$$Y_{rea,c}(r, l) = \left. \frac{dr}{dt} \right)_{rea,c} = -K_c(r, l) \left(\frac{C_{O_2,p} W_c}{\rho_c} \right) \quad (4.2)$$

Neste trabalho aplica-se uma taxa de reação média para as diferentes espessuras de camada de cinzas envolvendo os núcleos carbonáceos, dado por:

$$Y_{rea,c}(l) = - \frac{\int_{r_0=l}^{r_f=r_{m,a}} K_c(r, l) \left(\frac{C_{O_2,p} W_c}{\rho_c} \right) P_a(r) dr}{\int_{r_0=l}^{r_f=r_{m,a}} P_a(r) dr} \quad (4.3)$$

Da mesma forma, a derivada de taxa de reação de um núcleo carbonáceo de raio l contida em uma partícula de carvão de raio r é apresentada como:

$$Y'_{rea,c}(r,l) = \frac{d}{dl} [Y_{rea,c}(r,l)] = -K_c(r,l) \left(\frac{C_{O_2,p} W_c}{\rho_c} \right) \left(\frac{4l^2}{ShD_g \alpha r} - \frac{2l-r}{D_a \alpha r} \right) \quad (4.4)$$

Adotando-se o mesmo procedimento utilizado na equação (4.3), tem-se que a derivada de taxa de reação média dos núcleos resulta:

$$Y'_{rea,c}(l) = - \frac{\int_{r_0=l}^{r_f=r_{m,a}} Y'_{rea,c}(r,l) P_a(r) dr}{\int_{r_0=l}^{r_f=r_{m,a}} P_a(r) dr} \quad (4.5)$$

Cinzas:

Para $0 < r \leq r_{cri,a}$:

$$P_a(r) = \frac{F_{0,a}}{F_{0v} M_a} P_{0,a}(r) + \frac{R_{atr,a}}{F_{0v} M_a} P_{f,a}(r) - \frac{F_{e,a}}{F_{0v} M_a} P_{e,a}(r) +$$

$$- \frac{\delta [r - (r_{f,a} - \Delta r)] Y_{atr,a} P_a(r_{f,a} - \Delta r/2)}{F_{0v} \Delta r} \quad (4.6)$$

Para $r_{cri,a} < r \leq r_{m,a}$:

$$\frac{d}{dr} [P_a(r)] + \left[\frac{F_{0v}}{Y_{atr,a}} - \frac{3}{r} \right] P_a(r) = +$$

$$+ F_{0,a} \frac{P_{0,a}(r)}{M_a Y_{atr,a}} + R_{atr,a} \frac{P_{f,a}(r)}{M_a Y_{atr,a}} - F_{e,a} \frac{P_{e,a}(r)}{M_a Y_{atr,a}} \quad (4.7)$$

A taxa de encolhimento das cinzas devido ao atrito é obtida de Merrick e Highley (1974), e é dada por:

$$Y_{atr,a} = -\frac{k_{1,a}}{3} \bar{r}_a (U - U_{mf}) \quad (4.8)$$

Desta forma, a taxa mássica de geração de finos de cinzas por atrito, equação (3.40), pode ser dada como:

$$R_{atr,a} = -3M_a \int_{r_{f,a}}^{r_{m,a}} \frac{P_a(r)}{r} Y_{atr,a} dr \quad (4.9)$$

Calcário:

Para $0 < r \leq r_{cri,l}$:

$$P_l(r) = \frac{F_{0,l}}{F_{0v}M_l} P_{0,l}(r) + \frac{R_{atr,l}}{F_{0v}M_l} P_{f,l}(r) - \frac{F_{e,l}}{F_{0v}M_l} P_{e,l}(r) + \frac{\delta[r - (r_{f,l} - \Delta r)] Y_{atr,l} P_l(r_{f,l} - \Delta r/2)}{F_{0v}\Delta r} \quad (4.10)$$

Para $r_{cri,l} < r \leq r_{m,l}$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} [P_l(r)] + \left[\frac{F_{0v}}{Y_{atr,l}} - \frac{3}{r} \right] P_l(r) = + \\ + F_{0,l} \frac{P_{0,l}(r)}{M_l Y_{atr,l}} + R_{atr,l} \frac{P_{f,l}(r)}{M_l Y_{atr,l}} - F_{e,l} \frac{P_{e,l}(r)}{M_l Y_{atr,l}} \end{aligned} \quad (4.11)$$

Adotando que a taxa de encolhimento das partículas de calcário devido ao atrito seja a mesma apresentada para as cinzas, tem-se:

$$Y_{atr,l} = -\frac{k_{1,l}}{3} \bar{r}_l (U - U_{mf}) \quad (4.12)$$

E a taxa mássica de geração de finos de calcário como:

$$R_{atr,l} = -3M_l \int_{r_{f,l}}^{r_{m,l}} \frac{P_l(r)}{r} Y_{atr,l} dr \quad (4.13)$$

4.2.2 Equações de arraste e elutriação do particulado

- Arraste e elutriação dos sólidos abrasivos da classe *critical fines*:

Cinzas:

$$F_{cri,a} = \frac{1}{A} \left[\int_0^{r_{cri,a}} F_{0,a} P_{0,a}(r) dr + \int_0^{r_{cri,a}} R_{atr,a} P_{f,a}(r) dr \right] \quad (4.14)$$

$$P_{cri,a}(r) = \frac{1}{AF_{cri,a}} \left[P_{0,a}(r) \left(\frac{\int_0^{r_{cri,a}} F_{0,a} P_{0,a}(r) dr}{\int_0^{r_{cri,a}} P_{0,a}(r) dr} \right) + P_{f,a}(r) \left(\frac{\int_0^{r_{cri,a}} R_{atr,a} P_{f,a}(r) dr}{\int_0^{r_{cri,a}} P_{f,a}(r) dr} \right) \right] \quad (4.15)$$

Calcário:

$$F_{cri,l} = \frac{1}{A} \left[\int_0^{r_{cri,l}} F_{0,l} P_{0,l}(r) dr + \int_0^{r_{cri,l}} R_{atr,l} P_{f,l}(r) dr \right] \quad (4.16)$$

$$P_{cri,l}(r) = \frac{1}{AF_{cri,l}} \left[P_{0,l}(r) \left(\frac{\int_0^{r_{cri,l}} F_{0,l} P_{0,l}(r) dr}{\int_0^{r_{cri,l}} P_{0,l}(r) dr} \right) + P_{f,l}(r) \left(\frac{\int_0^{r_{cri,l}} R_{atr,l} P_{f,l}(r) dr}{\int_0^{r_{cri,l}} P_{f,l}(r) dr} \right) \right] \quad (4.17)$$

- Arraste de partículas provenientes do mecanismo de estouro de bolhas:

O fluxo mássico total de partículas ejetadas do leito para o *freeboard* devido ao coalescimento e estouro de bolhas na superfície do leito é dada como:

$$F_{est} = f_{est} \rho_p (1 - \varepsilon_{mf}) (U - U_{mf}) \sum_{k=2}^n [(k-1) \xi_{ejet,k} P_k] \quad (3.54)$$

Desta forma tem-se:

Calcário:

$$F_{est,l} = F_{est} X_l \quad (4.18)$$

$$F_{L+,l}(z) = F_{L+,l}(0) \exp\left[\frac{z}{Z} \ln(\zeta_2)\right] \quad (4.19)$$

$$F_{S+,l}(z) = F_{S+,l}(0) \exp\left[-\zeta_3 F_{L+}(0) a(z)\right] \quad (4.20)$$

Cinzas+ núcleos carbonáceos:

Neste caso convém analisar o fluxo mássico de partículas de carvão, que são constituídos por cinzas e núcleos de carvão como:

$$F_{est,c+a} = F_{est} (X_c + X_a) \quad (4.21)$$

$$F_{L+,c+a}(z) = F_{L+,c+a}(0) \exp\left[\frac{z}{Z} \ln(\zeta_2)\right] \quad (4.22)$$

$$F_{S+,c+a}(z) = F_{S+,c+a}(0) \exp\left[-\zeta_3 F_{L+}(0) a(z)\right] \quad (4.23)$$

Nas equações acima X_l , X_c e X_a representam, respectivamente, frações mássicas de calcário, núcleos carbonáceos e cinzas presente no leito.

- Taxa de elutriação e distribuição granulométrica do material elutriado:

Cinzas:

$$F_{e,a} = AF_{cri,a} + A\left[F_{S+,c+a}(\lambda) + F_{L+,c+a}(\lambda)\right] \left[\frac{X_a}{X_a + X_c}\right] \quad (4.24)$$

$$P_{e,a}(r) = P_{cri,a}(r) \left(\frac{AF_{cri,a}}{F_{e,a}} \right) + \frac{P_a(r)}{\int_{r_{cri,a}}^{r_{div,a}} P_a(r) dr} \left(\frac{AF_{S+,a}(\lambda)}{F_{e,a}} \right) + \frac{P_a(r)}{\int_{r_{m,a}}^{r_{div,a}} P_a(r) dr} \left(\frac{AF_{L+,a}(\lambda)}{F_{e,a}} \right) \quad (4.25)$$

Calcário:

$$F_{e,l} = A \left[F_{cri,l} + F_{S+,l}(\lambda) + F_{L+,l}(\lambda) \right] \quad (4.26)$$

$$P_{e,l}(r) = P_{cri,l}(r) \left(\frac{AF_{cri,l}}{F_{e,l}} \right) + \frac{P_l(r)}{\int_{r_{cri,l}}^{r_{div,l}} P_l(r) dr} \left(\frac{AF_{S+,l}(\lambda)}{F_{e,l}} \right) + \frac{P_l(r)}{\int_{r_{div,l}}^{r_{m,l}} P_l(r) dr} \left(\frac{AF_{L+,l}(\lambda)}{F_{e,l}} \right) \quad (4.27)$$

Núcleos carbonáceos:

A taxa mássica de elutriação de núcleos de carvão é dada pelo arraste direto das partículas de carvão na alimentação da classe *critical fines*, mais o arraste de núcleos carbonáceos contidos nas partículas de carvão ejetadas pelo mecanismo de estouro de bolhas. Assim, tem-se:

$$F_{e,c} = \int_0^{r_{cri,c}} F_{0,c} P_{0,c}(r) dr + A \left[F_{S+,c+a}(\lambda) + F_{L+,c+a}(\lambda) \right] \frac{X_c}{X_a + X_c} \quad (4.28)$$

A distribuição granulométrica de núcleos carbonáceos elutriados pode ser expresso como:

$$P_{e,c}(r^*) = P_{0,c}(r) U(0, r_{cri,a}) + P_c(r) \left(\frac{P_{e,a}(r)}{P_a(r)} \right) U(r_{cri,a}, r_{m,a}) \quad (4.29)$$

Sendo,

$U(r_1, r_2)$ Função filtro unitário, definida como 1 no intervalo $r_1 > r \geq r_2$ e nula nos demais pontos, *adimensional*.

$$P_{e,a}(r) = \frac{P_{e,c}(r^*)}{\int_0^{r_{m,c}} P_{e,c}(r^*) dr^*} \quad (4.30)$$

4.2.3 Determinação de concentrações de gases

Neste trabalho somente aplica-se os balanços mássicos conservativos de espécies somente para os gases oxigênio e dióxido de enxofre. Assim, as equações conservativas destes gases ao longo do reator são apresentadas como:

SO₂:

Emulsão.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{E,SO_2} \frac{\partial}{\partial x} C_{E,SO_2}(x, y) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[D_{E,SO_2} \frac{\partial}{\partial y} C_{E,SO_2}(x, y) \right] + \\ - \frac{1}{\varepsilon_{mf} H_{mf}} \left[\frac{1}{A} \int_0^{H_{mf}} A_B K_{BE,SO_2} dz + U_{mf} \right] C_{E,SO_2}(x, y) = - \frac{U_{mf}}{\varepsilon_{mf} H_{mf}} C_{0,SO_2} + \\ - \frac{1}{\varepsilon_{mf} H_{mf}} \left[\frac{1}{A} \int_0^{H_l} A_B K_{BE,SO_2} C_{B,SO_2}(h) dz \right] + \sum_{j=1}^{M_{exp}} \alpha_{j,SO_2} r_{E,j} \end{aligned} \quad (4.31)$$

Bolhas.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dh} \left[A_B U_B C_{B,SO_2}(h) \right] = \frac{d}{dh} \left[A_B D_{B,SO_2} \frac{d}{dh} C_{B,SO_2}(h) \right] + \\ - A_B K_{BE,SO_2} \left[C_{B,SO_2}(h) - \bar{C}_{E,SO_2} \right] + A_B \sum_{j=1}^{M_{exp}} \alpha_{j,SO_2} r_{B,j} \end{aligned} \quad (4.32)$$

Freeboard.

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[U_F C_{F,SO_2}(z) \right] = \frac{\partial}{\partial z} \left[D_{F,SO_2} \epsilon_f \frac{\partial}{\partial z} C_{F,SO_2}(z) \right] + \epsilon_f \sum_{j=1}^{M_{exp}} \alpha_{j,SO_2} r_{F,j} \quad (4.33)$$

O_2 :

Emulsão.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{E,O_2} \frac{\partial}{\partial x} C_{E,O_2}(x,y) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[D_{E,O_2} \frac{\partial}{\partial y} C_{E,O_2}(x,y) \right] + \\ - \frac{1}{\epsilon_{mf} H_{mf}} \left[\frac{1}{A} \int_0^{H_{mf}} A_B K_{BE,O_2} dz + U_{mf} \right] C_{E,O_2}(x,y) = - \frac{U_{mf}}{\epsilon_{mf} H_{mf}} C_{0,O_2} + \\ - \frac{1}{\epsilon_{mf} H_{mf}} \left[\frac{1}{A} \int_0^{H_l} A_B K_{BE,O_2} C_{B,O_2}(h) dz \right] + \sum_{j=1}^{M_{exp}} \alpha_{j,O_2} r_{E,j} \end{aligned} \quad (4.34)$$

Bolhas.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dh} \left[A_B U_B C_{B,O_2}(h) \right] = \frac{d}{dh} \left[A_B D_{B,O_2} \frac{d}{dh} C_{B,O_2}(h) \right] + \\ - A_B K_{BE,O_2} \left[C_{B,O_2}(h) - \bar{C}_{E,O_2} \right] + A_B \sum_{j=1}^{M_{exp}} \alpha_{j,O_2} r_{B,j} \end{aligned} \quad (4.35)$$

Freeboard.

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[U_F C_{F,O_2}(z) \right] = \frac{\partial}{\partial z} \left[D_{F,O_2} \epsilon_f \frac{\partial}{\partial z} C_{F,O_2}(z) \right] + \epsilon_f \sum_{j=1}^{M_{exp}} \alpha_{j,O_2} r_{F,j} \quad (4.36)$$

Reações químicas e taxas de reações:

Assume-se que todo enxofre, nitrogênio e oxigênio presentes na composição do carvão sejam instantaneamente convertidos em SO_2 , NO_2 e O_2 nos pontos de alimentação do carvão para o leito, na fase de emulsão, através das seguintes reações:

Assume-se que o carbono e o hidrogênio presentes nos voláteis do carvão sejam liberados no topo do leito, e sejam convertidos logo acima da sua superfície em CO_2 e H_2O através das equações:

Assume-se que a reação heterogênea do consumo do carbono fixo no núcleo carbonáceo seja dada por :

Assume-se também que, todo monóxido de carbono formado pela equação (4.42) seja convertido em dióxido de carbono ainda na fase de emulsão pela reação:

A taxa de consumo total de carbono fixo pode ser expressa como (ver APÊNDICE A):

$$R_{rea,c} = \frac{3M_c}{4\pi AH_{mf}} \int_{l_0=0}^{l_f=l_{m,c}} \int_{r_0=l}^{r_f=r_{m,a}} \frac{P_c(l)P_a(r)}{l^3\rho_c + (r^3 - l^3)\rho_a} R_{rea,c}(r,l) dr dl \quad (A.8)$$

A taxa de combustão do carvão seco para uma partícula de carvão de raio externo r e raio interno l do núcleo é dada por:

$$R_{rea,c}(r,l) = (4\pi l^2) K_c C_{O_2,p} \quad (A.23)$$

Supõe-se controle de reação pelos mecanismos combinados de difusão do oxigênio externo à partícula de carvão, difusão do oxigênio pela camada de cinzas reagida, e cinética da reação na superfície do núcleo. Então, o coeficiente global de taxa de reação, K_c , levando em conta os diferentes mecanismos de controle de reação, e supondo que a reação heterogênea seja dada pela via (4.42), resulta (ver APÊNDICE A):

$$\frac{1}{K_c} = \frac{1}{k_c} + \frac{l^2}{ShD_g r} + \frac{l(r-l)}{D_a r^2} \quad (4.44)$$

No cálculo do coeficiente global de taxa de reação do carbono fixo, adota-se correlação proposta por Smith (1978) para avaliação do coeficiente de taxa de reação intrínseco da combustão do carvão, dada por:

$$k_c = 20,85T_s \exp\left(-\frac{21600}{T_s}\right) \quad (4.45)$$

Sendo

T_s Temperatura na superfície do núcleo carbonáceo, K.

Considera-se as reações de absorção dos gases de enxofre pelas partículas de calcário. Estudos experimentais realizados no **NETeF** (DA SILVA, 2003; SAMANIEGO, 2003; MICHELS JR., 2004; ÁVILA, 2008) indicam que tanto os óxidos de cálcio quanto de magnésio sejam ativos na absorção de gases de enxofre. Admite-se que as reações globais de absorção dos gases de enxofre sejam dadas pelas seguintes reações:

A taxa de absorção total do enxofre pelas partículas de calcário é dada por (APÊNDICE A):

$$R_{rea,l} = \frac{3M_l}{4\pi\rho_l A H_{mf}} \int_{r=0}^{r=r_{m,l}} \frac{P_l(r) R_{rea,l}(r)}{r^3} dr \quad (A.31)$$

A taxa de absorção de enxofre por uma partícula de calcário de raio r é fornecida como:

$$R_{rea,l}(r) = (4\pi r^2) K_l C_{SO_2,p} \quad (A.40)$$

Supõe-se controle de reação pelos mecanismos combinados de difusão de SO_2 externo a partícula e cinético. O mecanismo cinético é compreendido como a composição de cinética das reações químicas com a difusão intra-partícula, e é frequentemente referenciado como intrínseco. Então, o coeficiente global de taxa de absorção resulta (APÊNDICE A):

$$\frac{1}{K_l} = \frac{1}{k_l} + \frac{2r}{ShD_g} \quad (A.41)$$

Supondo que a reação de absorção confinada nas regiões periféricas da partícula e a difusividade em poros o limitante da reação, Dennis e Hayhurst (1990) propuseram um coeficiente inicial de taxa de reação intrínseca de absorção de enxofre, k_{l0} , dado por:

$$k_{l0} = (k_{calcário} S_0 D_{e0})^{0.5} \quad (4.46)$$

Sendo,

$k_{calcário}$ Coeficiente de taxa de reação intrínseca do calcário por unidade da superfície externa da partícula, m/s .

D_{e0} Difusividade efetiva do SO_2 nos poros da partícula de calcário antes da sulfatação, m^2/s ;

S_0 Área BET da partícula de calcário antes da sulfatação, m^2/m^3 ;

Estes mesmos autores propõem que o coeficiente de taxa de reação intrínseca do calcário por unidade sua superfície externa da partícula seja:

$$k_{calcário} = 0,005 \exp\left(\frac{-4570,4}{T_l}\right) \quad (4.47)$$

E supondo que o decaimento do coeficiente de taxa de reação intrínseca do calcário ao longo do tempo de residência da partícula no leito seja o mesmo apresentado por Denis e Hayhurst (1990), tem-se:

$$k_l = (k_{l0}) \frac{f_1}{t_{res}} \quad (4.48)$$

Sendo,

t_{res} Tempo de residência da partícula de calcário, s;

f_1 Fator de ajuste, s;

O tempo de residência médio da partícula de calcário no leito é dado como:

$$t_{res} = \frac{M_l}{F_{0,l}} \quad (4.49)$$

O fator de ajuste da equação (4.48) é fornecido pela seguinte relação:

$$\left\{ \begin{array}{ll} f_1 = -0,5 \left(\frac{t_{res}}{80} \right)^2 + \frac{t_{res}}{3,2} + 137,5 & \text{Se } t_{res} < 2000s \\ f_1 = 450 & \text{Se } t_{res} \geq 2000s \end{array} \right. \quad (4.50)$$

CAPITULO 5 - PROCEDIMENTO DE SOLUÇÃO E ROTINA COMPUTACIONAL

Nesta seção apresenta-se o procedimento numérico para resolução das equações descritas no capítulo anterior e o atual estado do código computacional para simulação fenomenológica de combustão de carvões minerais com altos teores de cinzas.

5.1 Procedimento numérico

Na Figura 5.1 é apresentado o fluxograma do procedimento de simulação, sendo o processo de convergência realizado em duas etapas. Na primeira etapa, a taxa de sangria é atualizada em ciclo iterativo até que a carga total de material sólido no leito determinado nas rotinas de distribuições granulométrica se igualem as cargas calculadas através da altura fixa do leito e de parâmetros de fluidização. Ocorrendo convergência nesta primeira etapa, as concentrações de gases de interesse são calculadas a partir das novas taxas de reação e coeficientes de transporte de massa, e as concentrações médias dos gases na emulsão são comparados com as concentrações da iteração anterior. Caso não ocorra a convergência, são adotadas as novas concentrações médias na emulsão e o processo iterativo retorna para a primeira etapa até que ambas as etapas converjam.

As equações diferenciais das distribuições granulométricas do particulado são resolvidas em suas equações parciais através da aplicação do método de integração de *Adams* de ordem-variável e passo-variável, através de subrotina NAG D02CBF. As equações diferenciais para concentrações de gases nas fases de bolhas e freeboard são resolvidas pela NAG D02GAF, que soluciona os valores de contorno de uma EDO através de técnica de correção adiada e iteração de *Newton*. A equação diferencial das concentrações de gases na emulsão é resolvida pelo método de discretização de uma EDP elíptica de segunda ordem em uma região retangular, através do uso da NAG D03EEF. As integrações necessárias no desenvolvimento dos cálculos de atrito, taxas de reação e elutriação, propriedades médias e

condições de normalização são realizadas através do uso de NAG D01GAF, que integra uma função discreta usando uma formulação diferencial finita de terceira ordem. A integração necessária para o cálculo da probabilidade de coalescência de duas ou mais bolhas na superfície do leito é realizada pelo uso da NAG D01AMF definida para uso em intervalos finitos e semi-infinitos.

O procedimento numérico para solução de distribuições granulométricas apresenta complexidades relacionadas a descontinuidades de termos de geração. Neste caso adota-se procedimento proposto por Milioli (1991), e fundamentado em O'Neil (1987), onde soluções parciais são obtidas para regiões de continuidade, e soluções finais são dadas a partir da composição dessas soluções parciais. As equações de conservação das espécies gasosas, por sua vez, não apresentam nenhuma complexidade relacionada a descontinuidades de seus termos e suas soluções são obtidas pela aplicação direta das subrotinas NAG.

5.2 Compilação e criação do programa executável de simulação

Utilizou-se durante o processo de criação do programa um código computacional desenvolvido inicialmente por Milioli (1991), e posteriormente estendido e modificado por Milioli (1998).

Um estudo de engenharia de programação reversa foi realizado no código fonte, que é construído em linguagem FORTRAN 90. O estudo foi realizado com intuito de compreender as diversas ordens de dependências entre as subrotinas do código e de suas variáveis, permitindo assim a inserção de novas rotinas e correlações, além de modificações nas já existentes e na procura e correções de possíveis erros de programação.

Na Figura 5.2 é apresentada a nova ordem hierárquica das subrotinas e funções utilizadas no novo código, enquanto na Tabela 5.1 apresenta-se uma descrição de cada função e subrotina relacionada na Figura 5.2.

Após as modificações no código fonte, este foi acoplado em uma plataforma de desenvolvimento do compilador Fortran Powerstation 4.0 junto com o pacote das rotinas numéricas da biblioteca NAG FG90 *plus*. A criação do programa executável e sua simulação ocorreram em um computador com processador Intel Core i5 de 2,27Ghz com 4GB de memória RAM.

E entre os principais parâmetros e dados de entrada do programa de simulação temos:

- Análise elementar e aproximada das espécies reativas;
- Taxas de alimentação dos sólidos;
- Temperatura média do processo;
- Esfericidade das partículas;
- Relação entre a velocidade de fluidização e de mínima fluidização;
- Dados geométricos do reator e seus periféricos;
- Altura do leito;
- Distribuições granulométricas das partículas da alimentação;
- Maior bitola das partículas da classe *critical fines* para cada espécie de sólido de interesse;
- Parâmetros de distribuição dos finos gerados por atrito para cada espécie sólida abrasiva de interesse;
- Diferença de temperatura superficial das partículas reativas em relação à temperatura do processo;
- Coeficientes de taxa de geração mássica por atrito das espécies sólidas abrasivas de interesse;
- Cargas iniciais dos sólidos presentes no leito;
- Posição de entrada das partículas de alimentação no leito;
- Concentrações iniciais dos gases de interesse na fase de emulsão;
- Parâmetros do modelo de ejeção da esteira das bolhas coalescendo na superfície do leito;
- Parâmetros do modelo de arraste e elutrição;

Entre os principais dados fornecidos na saída do programa temos:

- Concentrações espaciais dos gases na fase da emulsão, bolhas e *freeboard*, e as concentrações médias dos gases na fase de emulsão;
- Balanços mássicos das partículas por espécies sólidas (Taxas de elutriação, sangria, reação e alimentação);
- Carga e proporção mássica de todas as espécies sólidas presentes no leito;
- Parâmetros gerais das condições hidrodinâmicas do leito;
- Coeficientes de taxas de reação global por espécie reativa e coeficientes de taxa de reação difusiva externa e interna à partícula, e intrínsecos;
- Parâmetros gerais do modelo de arrasto e elutriação;
- Taxas de elutriação;
- Taxas de atrito e reação química no leito;
- Distribuições granulométricas das partículas no leito, na sangria e elutriado.

Figura 5.1 - Fluxograma do procedimento de simulação do modelo matemático (NAG – processo iterativo utilizando *NAG libraries*).

Tabela 5.1 - Descrição das subrotinas e funções presentes no atual estado do código computacional de simulação apresentado na Figura 5.2.

<i>Subrotina ou function.</i>	<i>Descrição.</i>
ADAMS	Subrotina para resolução de EDO de primeira ordem da distribuição granulométrica no leito de partículas reativas e não abrasivas.
ADAMS2	Subrotina para resolução de EDO de primeira ordem da distribuição granulométricas no leito de partículas abrasivas.
AIRFLU	Cálculo global de fluxo de gases.
BNDYO	Subrotina de auxílio à NAG D03EEF (O_2 na emulsão)
BNDYS	Subrotina de auxílio à NAG D03EEF (SO_2 na emulsão)
CARR0	Subrotina para cálculos de arraste de partículas do leito para o <i>freeboard</i> .
CARR1	Subrotina para cálculos de arraste e elutriação de partícula no <i>freeboard</i> .
CHARUT	Cálculo do consumo de carvão.
CREAC	Cálculos do coeficiente de taxa de reação global da combustão da partícula de carvão por faixa de bitola e global.
D01AMF	Subrotina do pacote NAG <i>library</i> . Integração numérica de um intervalo semi-infinito.
D01GAF	Subrotina do pacote NAG <i>library</i> . Integração numérica de intervalo finito.
D02CBF	Subrotina do pacote NAG <i>library</i> . Resolução de EDO de primeira ordem por método de Adams.
D03EDF	Subrotina do pacote NAG <i>library</i> .
D03EEF	Subrotina do pacote NAG <i>library</i> . Resolução de EDP.
DRAG	Subrotina para escolha dos coeficientes de arraste de partículas.
ELUT1	Cálculos do modelo de arraste e elutriação das partículas.
F	Função de auxílio da NAG D02CBF.
FCN	Subrotina de auxílio de NAG D02CBF relativo à partículas/sólidos reativos e não abrasivas.
FCNBO.	Subrotina de auxílio de NAG D02GAF relativo ao O_2 na fase de bolhas.
FCNBS	Subrotina de auxílio de NAG D02GAF relativo ao SO_2 na fase de bolhas

Continua

Continuação

FCNFO	Subrotina de auxílio de NAG D02GAF relativo ao O_2 no <i>freeboard</i> .
FCNFS	Subrotina de auxílio de NAG D02GAF relativo ao SO_2 no <i>freeboard</i> .
FCNN	Subrotina de auxílio de NAG D02CBF relativo a partículas/sólidos abrasivos.
FINES	Cálculo de taxa de elutriação de <i>critical fines</i> .
HEIGHT	Cálculo de altura de desengajamento da partícula <i>larges</i> de diâmetro médio no leito.
LFLOW	Cálculo de taxa de elutriação de partículas <i>larges</i> elutriadas.
LREAC	Cálculo do coeficiente de taxa de reação global de absorção de SO_2 pela partícula de calcário por faixa de bitola e global
MORSI	Cálculo da altura de desengajamento de transporte pelo método de Morsi e Alexander (1972).
MPROP	Cálculos das propriedades médias do particulado do leito.
NOREAC	Resolução das distribuições granulométrica de partículas abrasivas na faixa dos <i>critical fines</i> .
O2BUB	Subrotina para resolução de EDO da concentração de O_2 na fase de bolhas.
O2EMU	Subrotina para resolução de EDP da concentração de O_2 na fase de emulsão.
O2FRE	Subrotina para resolução de EDO da concentração de O_2 no <i>freeboard</i> .
O2RES	Saída de dados das concentrações de O_2 na fase de bolhas, particulado e <i>freeboard</i> , e concentração média de O_2 na emulsão.
OUT	Subrotina de auxílio à NAG D02CBF
PDEFO	Subrotina de auxílio à NAG D03EEF referente ao O_2 na fase de emulsão.
PDEFS	Subrotina de auxílio a NAG D03EEF referente ao SO_2 na fase de emulsão
POPASH	Cálculo da distribuição granulométrica de cinzas de partículas de carvão no leito.
POPCHA	Cálculo da distribuição granulométrica de núcleos de carvão das partículas de carvão no leito.
POPLIM	Cálculo da distribuição granulométrica das partículas de calcário no leito.

Continua

Continuação

PROB	Subrotina para cálculo da probabilidade de ejeção de partículas provenientes da esteira de bolhas devido ao coalescimento e estouro de bolhas na superfície do leito.
RESELU	Saída de dados dos parâmetros de elutriação, granulometria dos sólidos no elutriado e taxas mássicas de elutriação.
RESULTS	Saída de dados das condições operacionais, gerais de fluidização, cargas de partículas no leito, distribuições granulométricas e etc.
ROSIN	Cálculo da distribuição de finos gerados por atrito dado pela distribuição de <i>Rosin-Rammler</i> .
SEIVE	Subrotina de auxílio de RESULTS.
SFLOW	Cálculo de taxa de elutriação de partículas <i>smalls</i> .
SO2BUB	Subrotina para resolução de EDO da concentração de SO_2 na fase de bolhas.
SO2EMU	Subrotina para resolução de EDP da concentração de SO_2 na fase de emulsão.
SO2FRE	Subrotina para resolução de EDO da concentração de SO_2 no <i>freeboard</i> .
SO2RES	Saída de dados das concentrações de SO_2 na fase de bolhas, particulado e <i>freeboard</i> , e concentração média na emulsão.
UTER	Cálculo da velocidade terminal da partícula.
X01AFF	Subrotina do pacote NAG library. Retorna máxima precisão do valor π
X04ABF	Subrotina do pacote NAG library. Retorna ou estabelece número

Figura 5.2 - Esquema da ordem hierárquica das subrotinas e funções do código computacional de simulação. Pontos em vermelho indicam menor ordem da hierarquia, em amarelo subrotinas da *libraries* NAG e em azul claro subrotina ou função de auxílio aos cálculos das rotinas NAG

.

CAPITULO 6 - RESULTADOS E DISCUSSÕES

Nesta seção, os resultados do modelo fenomenológico são comparados com resultados experimentais gerados no reator piloto de leito fluidizado do **NETeF**. Nesta verificação, são utilizados resultados experimentais dos trabalhos de Tureso (2004), Costa (2005) e mais quatros testes realizados em conjunto ao trabalho de modelagem, ver APÊNDICE B.

6.1 Principais dados de entrada do modelo

Em todos os experimentos foi utilizado o carvão CE-4500 procedente do estado de Santa Catarina e o calcário dolomítico de Ipéuna, região de Piracicaba-SP. Adotou-se nas simulações, que o perfil granulométrico destes particulados sejam os mesmos descritos no APÊNDICE B. Na Figura 6.1 são apresentados os perfis granulométricos destes materiais. Nas Tabelas 6.1 e 6.2 são apresentadas, respectivamente, a composição química elementar parcial e análise imediata do carvão (MORITA, 2009). Uma composição química elementar parcial do calcário é apresentada na Tabela 6.3 (CRNKOVIC, 2003).

A entrada de carvão no leito ocorre por gravidade através de um bocal de alimentação na face direita do reator, logo acima da superfície do leito. Assim, considera-se que a alimentação de carvão ocorre no topo do leito nas 5 posições mostradas na Figura 6.2 ;(109,37mm,0mm), (125mm;0), (140,63mm;0), (125mm; 15,63mm) e (125 mm; 15,63 mm).

Figura 6.1 – Perfis das distribuições granulométricas do carvão CE-4500 e calcário Ipeúna.

Tabela 6.1 - Composição química elementar parcial do carvão CE-4500 de forma normalizada (MORITA, 2009).

Elemento	C	H	N	O	S
%(b.u)	45,67	3,07	0,97	6,94	1,67
%(sem cinzas)	78,31	5,26	1,66	11,90	2,87

Tabela 6.2 - Análise imediata do carvão CE-4500 (MORITA, 2009).

Parâmetro	Composição em massa
Umidade	1,76
Carbono fixo	29,28
Voláteis	27,28
Cinzas	41,68

Tabela 6.3 - Composição química elementar parcial (% massa/% massa) do calcário dolomítico de Ipeúna (CRNKOVIC, 2003)

Elemento	Ca	Mg	Fe	Al	Sr	K	Mn
%	17,07	11,73	0,32	0,42	0,08	0,13	0,09

Figura 6.2 - Pontos de alimentação de carvão na superfície do leito.

A Tabela 6.4 apresenta os principais parâmetros do modelo e dados geométricos do reator considerados.

O coeficiente de taxa atrito das partículas de cinzas é encontrado na literatura variando em ordem de grandeza de 10^{-4} a $10^{-7} m^{-1}$ (MERRICK e HIGHLEY, 1974; PIS et al., 1991; TOME CZEK e MOCEK, 2007). Em uma primeira tentativa de simulação utilizou-se este coeficiente igual a $10^{-5} m^{-1}$ para as cinzas. Entretanto, em certas condições operacionais, o programa retornava erro de processamento. Devido a esta limitação, somente foi tentado coeficiente de taxa de atrito das cinzas na ordem de $10^{-5} m^{-1}$ nos testes de comparações dos perfis granulométricos. Utilizou-se nos demais testes coeficiente de taxa de atrito das cinzas igual a $10^{-6} m^{-1}$, enquanto o coeficiente de atrito das partículas de calcário foi fixado em todos os testes em $2,7 \cdot 10^{-7} m^{-1}$.

Supôs-se que os coeficientes da distribuição dos finos gerados por atrito das cinzas do carvão CE-4500 e calcário dolomítico fossem os mesmos empregados por Milioli (1991). Os parâmetros ζ_2 e ζ_3 do modelo de arraste e elutriação foram escolhidos para que as taxas de

elutriação de *small*s e *large*s resultassem duas ou mais ordens de grandeza menores que a taxa de elutriação de partículas *critical fines*. Assumiu-se um máximo raio das partículas *critical fines* de 40 μm .

Tabela 6.4 -Principais parâmetros do modelo e dados geométricos do reator.

Dados geométricos do reator					
$A =$	0,25	m^2	$H_l + H_f =$	2,90	m
Características do particulado.					
$k_{1,a} =^1$	$3,0.10^{-6} - 1,0.10^{-5}$	m^{-1}	$k_{1,l} =^2$	$2,7.10^{-7}$	m^{-1}
$n_a =^3$	1,073	adimen.	$n_l =^3$	1,073	adimen.
$b_a =^3$	0,0460	adimen.	$b_l =^3$	0,0166	adimen.
$\rho_{c+a} =^4$	1657	kg.m^{-3}	$\rho_l =^4$	2850 ¹	kg.m^{-3}
$\phi_p =$	0,7	adimen.			
Parâmetros de arraste e ejeção de particulado do leito.					
$\gamma =^5$	30	graus	$\sigma =^6$	0,4	adimen.
$r_{cri,a} =$	40	μm	$r_{cri,l} =$	40	μm
Parâmetros de arraste e elutriação no <i>freeboard</i> .					
$\zeta_1 =^7$	2,5	adimen.	$\zeta_3 =$	$1,0.10^{-9}$	m.s.kg^{-1}
$\zeta_2 =$	$1,0.10^3$	adimen.			
Coeficientes difusivos.					
$D_{B,i} =$	D_g	$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$	$D_{E,i} =^9$	0,1	$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$
$D_{F,i} =$	D_g	$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$	$D_a =^8$	$0,1D_g$	$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$
Outros					
$g =$	9,81	m.s^{-2}	$T_s =^{10}$	$T_l + 175\text{K}$	K

1)Merrick e Highley (1974), Pis et al (1991) e Tomeczech e Mocek (2007).

2)Merrick e Higley (1974).

3) Milioli (1991.)

4)Ávila (2008).

5) Clift e Grace (1971).

6)Hatano, Okuma e Ishida (1984).

7) Pemberton e Davidson (1986a)

8)Durão, Ferrão e Heitor (1989).

9)Niklasson et al . (2002).

10)Ross e Davidson (1982).

O coeficiente de difusão de gases através das cinzas do carvão é apresentado por Durão, Ferrão e Heitor (1989), e Durão et al . (1990) para um carvão antracito português com

alto teor de cinzas variando entre $10^{-1} D_g$ a $10^{-3} D_g$, sendo propostos por estes autores o uso deste coeficiente entre $0,1 D_g$ a $0,24 D_g$. Durão et al. (1990) argumentam que baixos valores do coeficiente de difusão dos gases pela camada de cinzas normalmente ocorrem para partículas finas, pois estas são rapidamente elutriadas, não permitindo que seus poros aumentem de tamanho durante a combustão do carvão. Estudos experimentais realizados por Engelen e Honning (1995) para vários tipos de carvões indicam que a difusividade efetiva em poros esteja em torno de $10^{-5} m^2 s^{-1}$, sendo esta a ordem de magnitude da difusão molecular através de uma rede de macroporos (ENGELLEN e HONING, 1995). A partir destas observações, adotou-se a difusividade efetiva dos gases através das cinzas reagidas de $0,1 D_g$ (DURÃO et al., 1990)

Supôs-se um coeficiente de difusão turbulenta dos gases na emulsão igual ao coeficiente de dispersão radial dos sólidos no leito. Esta suposição é realizada em analogia aos modelos que utilizam da taxa de mistura dos sólidos na emulsão para avaliar a dispersão dos gases gerados na devolatilização (RAJAN, KRISHNAN e WEN, 1978; RAJAN e WEN, 1980; OVERTURF e REKLAITIS, 1983). Niklasson et al. (1991) sugerem que o coeficiente de difusão radial dos sólidos em combustores de leito fluidizado seja de $0,1 m^2 s^{-1}$ quando a alimentação do combustível ocorre pela superfície do leito, sendo este valor adotado para o coeficiente de difusão turbulenta.

Ross e Davidson (1982) argumentam que em muitas pesquisas realizadas em combustores de leito fluidizado, os valores da temperatura na superfície da partícula de carvão excedem a temperatura do leito em 150 a 200 K. Assim, adota-se que a temperatura na superfície do núcleo de carvão seja de 175 K acima da temperatura no leito para avaliação da taxa de reação química na superfície do núcleo.

Utilizou-se como critérios de convergência do programa um erro absoluto de 10^{-4} para carga de sólidos no leito, e de 10^{-3} para as concentrações de gases na emulsão.

6.2 Resultados de simulações e comparação com dados experimentais

Na Tabela 6.5 são apresentados os principais parâmetros operacionais dos testes realizados no reator piloto do *NETeF* e utilizados para comparação com resultados do modelo fenomenológico. Os testes estão organizados na tabela em ordem com seus respectivos testes zero, isto é, sem a presença de calcário. Os testes 1 a 15 são obtidos de Costa (2005), os testes 15 a 19 de Tureso (2004), e os testes 19 a 22 são apresentados no APÊNDICE B. Todos os experimentos utilizaram o carvão CE-4500 e o calcário dolomítico de Ipéuna, com suas distribuições granulométricas de alimentação apresentadas na Figura 6.1.

Entre os dados fornecidos pela Tabela 6.5, tem-se a altura do leito expandido, a temperatura do leito, as velocidades de fluidização e de mínima fluidização, as taxas de alimentação de carvão e calcário, a razão molar de alimentação $(Ca+Mg)/S$ e a razão de equivalência.

As razões molares $(Ca+Mg)/S$ são calculadas a partir das composições apresentadas nas Tabelas 6.1 e 6.3. A razão de equivalência ϕ é calculada a partir das composições fornecidas pela Tabela 6.1 e das reações apresentadas nas equações (4.37) a (4.40). A vazão do ar de fluidização é calculada supondo que o ar seja um gás perfeito.

As comparações entre os resultados do modelo e dados empíricos das concentrações de gases no leito e *freeboard*, e das distribuições granulométricas do material particulado no leito e elutriado, são realizados somente para os testes 19 a 22 devido à carência destas informações nos demais testes.

Tabela 6.5 – Principais parâmetros experimentais de vários experimentos no reator de leito fluidizado piloto do NETeF utilizados na comparação do modelo fenomenológico.

Teste	H_l (m)	T_l (K)	U (m/s)	$F_{0,c+a}$ (kg/h)	U_{mf}^* (m/s)	$F_{0,l}$ (kg/h)	$\frac{Ca+Mg}{S}$	ϕ^*
1 ^a	0,170	1160	0,60	18,432	0,03	0	0	0,69
2 ^a	0,170	1149	0,59	18,432	0,04	3,348	3,16	0,70
3 ^a	0,170	1158	0,59	18,432	0,05	6,660	6,29	0,70
4 ^a	0,170	1159	0,58	18,432	0,06	10,008	9,45	0,71
5 ^a	0,170	1142	0,57	18,432	0,07	13,320	12,58	0,71
6 ^a	0,170	1233	0,57	18,432	0,03	0	0	0,77
7 ^a	0,170	1162	0,59	18,432	0,04	3,348	3,16	0,70
8 ^a	0,170	1153	0,58	18,432	0,05	6,660	6,29	0,71
9 ^a	0,170	1171	0,59	18,432	0,06	10,008	9,45	0,71
10 ^a	0,170	1137	0,57	18,432	0,07	13,32	12,58	0,71
11 ^a	0,340	1141	0,59	22,932	0,03	0	0	0,69
12 ^a	0,340	1133	0,59	22,932	0,04	4,14	3,14	0,68
13 ^a	0,340	1114	0,58	22,932	0,05	8,316	6,31	0,68
14 ^a	0,340	1102	0,58	22,932	0,06	12,456	9,45	0,68
15 ^{a,b}	0,340	1101	0,58	22,932	0,07	16,596	12,60	0,68
16 ^b	0,340	1123	0,60	25,164	0,07	18,216	12,60	0,92
17 ^b	0,340	1123	0,60	27,576	0,07	19,98	12,61	1,00
18 ^b	0,340	1123	0,56	29,664	0,07	21,492	12,61	1,16
19 ^c	0,270	1108	0,33	17,568	0,02	0	0	1,15
20 ^c	0,270	1113	0,33	17,568	0,03	6,516	6,46	1,15
21 ^c	0,270	1123	0,47	19,620	0,02	0	0	0,91
22 ^c	0,270	1123	0,47	19,620	0,04	7,27	6,46	0,91

a. Costa (2005).

b. Tureso (2004).

c. Neste trabalho

Teste 19- Corrida 0.33C4.88L0T1108

Teste 20 - Corrida 00.33C4.88L1.81T1113

Teste 21 – Corrida 0.47C5.45L0T1123

Teste 22 – Corrida 0.47C5.45L2.02T1123

* Calculado por simulação.

6.2.1 Perfil das concentrações de gases SO_2 e O_2

A) Perfil das concentrações dos gases no leito.

Nas Figuras 6.3 e 6.4 são apresentadas os resultados de simulações para as concentrações de SO_2 e O_2 nas fases de emulsão e de bolhas para os testes 19 a 22, sendo os testes 19 e 21 realizados sem adição de calcário, e os testes 20 e 22 com adição de calcário. A origem do sistema cartesiano de coordenadas é o ponto central ao nível do topo dos injetores com as coordenadas x e y apresentadas na Figura 6.2, e a coordenada z como a altura do reator.

Nota-se que as concentrações de SO_2 são máximas nos pontos de alimentação do carvão para o leito, devido à hipótese de oxidação instantânea do enxofre presente no carvão, com posterior difusão para o resto da emulsão (Figuras 6.3 e 6.4). Percebe-se a variação na fase de bolhas da concentração de SO_2 desde zero até um máximo no topo do leito, e a grande redução tanto na fase de bolhas quanto de emulsão devido à adição de calcário (teste 19 x 20, Figura 6.3, e teste 21 x 22, Figura 6.4).

A concentração de oxigênio na fase de emulsão permaneceu aproximadamente constante, com exceção dos pontos de alimentação de carvão onde houve um ligeiro acréscimo (Figuras 6.3 e 6.4). Este acréscimo deve-se à suposição de que o oxigênio presente no carvão seja liberado e convertido em O_2 nos pontos de alimentação, enquanto que sua quantidade (Tabela 6.1) é superior a utilizada na oxidação do nitrogênio e do enxofre (equações 4.37 e 4.38) liberados também nestas posições.

Percebe-se uma mudança nas concentrações de oxigênio na fase de emulsão entre os testes com e sem calcário e que utilizam a mesma velocidade de fluidização (testes 19x20 e 21x22). Para ambas as velocidades de fluidização há aumento nas concentrações de O_2 com a adição de calcário. Em princípio deveria haver redução devido ao consumo de O_2 na sulfatação. Contudo, com a adição de calcário também aumenta o peso do leito, causando aumento de U_{mf} . Com isso tem-se um maior fluxo de oxigênio das bolhas para emulsão. Esta suposição é coerente com o comportamento dos perfis das concentrações de oxigênio na fase de bolhas, que mostram queda de concentrações com o uso de calcário (Figuras 6.3 e 6.4).

Figura 6.3 - Perfis das concentrações de SO_2 e O_2 nas fases de emulsão e bolhas dadas por simulação para os testes 19 (sem uso de calcário) e 20 (com uso de calcário), com velocidade de fluidização de 0,33m/s.

Figura 6.4 - Perfis das concentrações de SO_2 e O_2 nas fases de emulsão e bolhas dadas por simulação para os testes 21 (sem uso de calcário) e 22 (com uso de calcário), com velocidade de fluidização de de $0,47m/s$.

Como demonstrados nas Figuras 6.3 e 6.4, o modelo apresenta coerência entre os resultados obtidos para as concentrações de gases na fase de emulsão e de bolhas

A comparação de resultados de simulação com experimentais é dificultada pelo fato das sondas de medição capturarem, de fato, misturas de gases provenientes das fases de bolhas e emulsão.

Considerando que bolhas estejam bem distribuídas pela seção transversal do leito denso, as concentrações medidas pelas sondas representam médias das concentrações das fases ponderada por suas velocidades. Assim, por questões de simplificação, assume-se que a concentração de um gás i no leito para comparação, seja:

$$C_{leito,i}(x, y, z) = \frac{C_{E,i}(x, y)U_{mf} + C_{B,i}(z)(U - U_{mf})}{U} \quad (6.1)$$

A partir dos resultados apresentados nas Figuras 6.3 e 6.4, os perfis de concentrações de SO_2 e O_2 são traçados, com o auxílio da equação (6.1), ao longo da altura do leito denso nas seções (0, 125mm), (0,0) e (0,125mm) e comparados com os resultados experimentais dos testes 19 a 22. As Figuras 6.5 a 6.8 apresentam os perfis das concentrações de SO_2 e O_2 obtidos experimentalmente e por simulação dos testes 19 a 22.

Nota-se uma boa concordância entre os resultados de simulação com os dados experimentais das concentrações de SO_2 no leito para os testes 20 (Figura 6.5), 21 e 22 (Figura 6.6). Para o teste 19 (Figura 6.5), os perfis das concentrações de SO_2 no leito obtidos por simulação superam consideravelmente os resultados experimentais. Nota-se, como indicado na Figura 6.5 para o teste 19, que nas regiões mais baixas do leito, onde as bolhas fornecem um maior fluxo de oxigênio para a emulsão, as concentrações de dióxido de enxofre resultam próximas às experimentais, enquanto nas regiões superiores resultam excessivas. Pode-se explicar esta discrepância lembrando que em condições redutoras, como ocorrido nos testes 19 e 20 (Tabela 6.5), o enxofre passa a formar sulfeto de hidrogênio em quantidades crescentes, e que este composto não é detectado pelos analisadores de gases empregados (TURESO, 2004).

As Figuras 6.7 e 6.8 apresentam as comparações dos perfis das concentrações de O_2 simulados e experimentais, dos testes 19 a 22. Todos os perfis de O_2 simulados no leito, com exceção do teste 19, apresentam uma boa concordância qualitativa com os perfis experimentais. Há, contudo, discrepâncias quantitativas, com as simulações consideravelmente superestimando os dados experimentais. Isso pode ser consequência de coeficientes de taxa de reação subestimados, elutriação excessiva, sangria excessiva, ou da desconsideração de possíveis processos reativos com a queima de voláteis na emulsão.

No caso do teste 19, onde há tanta discordância quantitativa quanto qualitativa, há a complexidade adicional relacionada à região redutora, que também ocorre no teste 20. Aparentemente, a presença de calcário no teste 20 torna menos relevantes os mecanismos de reação envolvendo a oxidação do monóxido de carbono, como nas consideradas nas presentes simulações.

Figura 6.5 - Comparações dos resultados do modelo (linha tracejada) com dados empíricos (símbolos) dos perfis das concentrações de SO_2 no leito nas seções (0,-125mm), (0,0) e (0,125mm). Testes 19 e 20.

Figura 6.6 - Comparações dos resultados do modelo (linha tracejada) com dados empíricos (símbolos) dos perfis das concentrações de SO_2 no leito nas seções (0,-125mm), (0,0) e (0,125mm). Testes 21 e 22.

Figura 6.7 - Comparações dos resultados do modelo (linha tracejada) com dados empíricos (símbolos) dos perfis das concentrações de O_2 no leito nas seções (0,-125mm), (0,0) e (0,125mm). Testes 19 e 20.

Figura 6.8 - Comparações dos resultados do modelo (linha tracejada) com dados empíricos (símbolos) dos perfis das concentrações de O_2 no leito nas seções (0,-125mm), (0,0) e (0,125mm). Testes 21 e 22.

B) Perfis das concentrações dos gases *freeboard*

As Figuras 6.9 e 6.10 apresentam os perfis das concentrações de SO_2 simuladas e experimentais para os testes 19 a 22 na região do *freeboard*. Nota-se que os perfis das concentrações de SO_2 simulados permaneceram constante no *freeboard* (Figuras 6.9 e 6.10), pois não são consideradas reações de absorção nesta região.

Percebe-se nos testes 19 e 21, que as concentrações simuladas finais de SO_2 superestimam as concentrações experimentais em até 1000 ppm. No caso das condições redutoras do teste 19 há possibilidade de formação de H_2S não detectado. Para ambos os testes, 19 e 21, há possibilidade de retenção de frações significativas S nas cinzas do carvão. Este fatores poderiam explicar as grandes discordâncias observadas.

Khan e Gibbs (1996) relatam que discrepâncias de até 10% nas concentrações de SO_2 na saída do reator não são surpreendentes nos testes realizados somente com carvão, pois parte do enxofre pode ser retidos pelas cinzas e uma quantidade de enxofre possa gerar SO_3 .

Nas simulações assume-se que todo o enxofre presente no carvão de alimentação seja convertido em SO_2 . O valor de aproximadamente de 2100 ppm é a máxima concentração possível de SO_2 saindo do reator considerando a concentração mássica de enxofre no carvão de 1,67%, como apresentado na Tabela 6.1, para o teste 21. Neste caso, uma possível explicação da grande diferença entre simulado e experimental esta na real fração de enxofre presente no carvão utilizado, que pode facilmente variar, mesmo dentro de um mesmo lote.

Nota-se nos dados empíricos do teste 19 (Figura 6.9), que parte do dióxido de enxofre é formado logo acima do leito denso na região de *splash*. Possivelmente, as condições redutoras do reator implicam que sua conversão ocorra somente no *freeboard* devido a disponibilidade de uma maior concentração de oxigênio vindo da fase de bolhas. Nos testes 20 a 22 (Figuras 6.9 e 6.10) as concentração empíricas de SO_2 permaneceram aproximadamente constantes. Pequenas variações destas concentrações advêm possivelmente da complexa hidrodinâmica dos gases no *freeboard*, e da não uniformidade das concentrações do SO_2 ao longo da seção transversal, como notado nas alturas de 0,65m onde foram tomadas três concentrações de gases, nos pontos: (180 mm, -125 mm), (0, -125 mm) e (-180 mm, -125 mm)

As Figuras 6.11 e 6.12 apresentam os perfis das concentrações de O_2 simuladas e experimentais para os testes 19 a 22 na região do *freeboard*. Observa-se a queda brusca da concentração de O_2 dadas por simulação logo acima do topo do leito em função da queima dos voláteis do carvão. Nas simulações que ocorreram em condições redutoras, teste 19 e 20, os perfis das concentrações de O_2 simuladas tendem a zero (Figura 6.11). Nas condições simuladas com excesso de ar, teste 21 e 22, as concentrações de O_2 simuladas tendem para concentrações próximas as apresentadas experimentalmente na saída do reator.

Experimentalmente, percebe-se um aumento das concentrações de oxigênio ao longo da altura do *freeboard* até a altura de 1,5m do reator (Figuras 6.11 e 6.12). Este evento está relacionado à diluição dos gases saindo da emulsão com os gases advindo da fase de bolhas. Nos testes experimentais 21 e 22, sob condições oxidantes, as concentrações de oxigênio mantiveram-se estáveis após a altura de 2,0 m. Nas condições redutoras dos testes 19 e 20 ocorre um decréscimo da concentração de O_2 devido à queima incompleta no leito e no início do *freeboard*.

Os perfis das concentrações de O_2 ao longo da altura do *freeboard* simulados e experimentais são discordantes. Isto ocorre pelas simplificações das reações assumidas incluindo a queima dos voláteis. Entretanto, os resultados simulados apresentam uma boa resposta final das concentrações de O_2 na saída do reator. No caso das concentrações de SO_2 , exceto para o teste 19, os resultados apresentam-se qualitativamente corretos.

Figura 6.9 - Comparações dos resultados do modelo (linha tracejada) com dados empíricos (símbolos) dos perfis das concentrações de SO_2 ao longo da altura do *freeboard*. Testes 19 e 20.

Figura 6.10 - Comparações dos resultados do modelo (linha tracejada) com dados empíricos (símbolos) dos perfis das concentrações de SO_2 ao longo da altura do *freeboard*. Testes 21 e 22.

Figura 6.11 - Comparações dos resultados do modelo (linha tracejada) com dados empíricos (símbolos) dos perfis das concentrações de O_2 ao longo da altura do *freeboard*. Testes 19 e 20.

Figura 6.12 - Comparações dos resultados do modelo (linha tracejada) com dados empíricos (símbolos) dos perfis das concentrações de O_2 ao longo da altura do *freeboard*. Testes 21 e 22.

6.2.2 Perfil das distribuições granulométricas.

A Tabela 6.6 fornece os diâmetros de divisão entre as classes de particulado *critical fines* e *small*s, e *small*s e *large*s das partículas de calcário e cinzas, além dos coeficientes de taxas de atrito utilizadas para os testes simulados de 19 a 22. A Tabela 6.7 apresenta as porcentagens mássicas por espécie sólida presente no leito e a massa do leito obtidas por simulação, em comparação com as porcentagens mássicas de combustível e massa do leito encontrados experimentalmente. As cargas mássicas de partículas no leito foram obtidas somente para os testes 20 e 22. A Tabela 6.8 apresenta os resultados das porcentagens mássicas por espécie sólida presente no elutriado simuladas em comparação a porcentagem mássica de combustível encontrada experimentalmente no testes 19 a 22.

Tabela 6.6 – Diâmetros de divisão entre as classes de particulados *critical fines*, *small*s e *large*s dadas por simulação, e os coeficientes de taxa de atrito das cinzas e calcário para os testes 19 a 22.

Teste	Calcário			Cinzas		
	$r_{cri,l}$	$r_{div,l}$	$k_{1,l}$	$r_{cri,a}$	$r_{div,a}$	$k_{1,a}$
	(μm)	(μm)	(m^{-1})	(μm)	(μm)	(m^{-1})
Teste 19	-	-	-	40	117	$1,0 \cdot 10^{-5}$
Teste 20	40	57	$2,7 \cdot 10^{-7}$	40	117	$1,0 \cdot 10^{-5}$
Teste 21	-	-	-	40	142	$3,0 \cdot 10^{-6}$
Teste 22	40	67	$2,7 \cdot 10^{-7}$	40	142	$1,0 \cdot 10^{-5}$

Tabela 6.7 – Porcentagem de carga mássica por espécie sólida no leito e massa total do leito dadas por simulação, e carga de combustível e massa do leito obtidas empiricamente para os testes 19 a 22.

Teste	Simulação			% de combustível	Massa do leito	
	% de peso por espécie sólida no leito			no leito	(kg)	
	Calcário	Cinzas	Núcleos	Experimental	Simulação	Experimental
19	-	97,60	2,40	1,84	16,13	-
20	29,44	69,54	1,02	1,73	25,51	75,0
21	-	97,24	2,76	0,94	13,60	-
22	37,74	61,19	1,07	0,85	23,13	41,0

Tabela 6.8 – Porcentagem de carga mássica por espécie sólida no elutriado e carga mássica de combustível no elutriado dados, respectivamente, por simulação e experimentalmente para os testes 19 a 22.

Teste	Simulação			% de combustível no elutriado
	% de peso por espécie sólida no elutriado			
	Calcário	Cinzas	Núcleos	Experimental
19	-	84,11	15,89	29,75
20	14,07	76,99	8,94	23,79
21	-	78,03	21,97	20,09
22	24,44	65,61	9,95	14,76

Percebe-se que as porcentagens mássicas de combustível no leito e no elutriado decaem nos testes realizados com calcário (testes 20 e 22). Esta mesma tendência é observada qualitativamente para os resultados de simulação das cargas mássicas de núcleos de carvão tanto no leito quanto no elutriado. No leito, o decaimento é explicado pelo aumento do fator de fluxo causado pela adição de calcário na alimentação, com conseqüente aumento da eficiência da queima do carvão devido à maior disponibilidade de oxigênio fluindo das bolhas para a emulsão. O decaimento de concentração de combustível no elutriado é conseqüência do seu decaimento no leito.

A Tabela 6.7 mostra que a massa do leito dada por simulação aumenta com a adição de calcário refletindo o fato de estar-se substituindo cinzas por calcário, de maior peso específico. Percebe-se ainda na Tabela 6.7, para os testes com calcário, 20 e 22, que a massa do leito obtida por simulação diverge quantitativamente e qualitativamente da experimental.

Na velocidade de fluidização do teste 22, mantendo a altura do leito constante, tem-se maior fração de vazios no leito, e conseqüentemente, uma massa do leito menor como observado experimentalmente. Esse efeito qualitativo é observado em ambas às comparações da simulação (testes 19 com 20 e 21 com 22), quando somente carvão é utilizado na alimentação. As discrepâncias quantitativas podem ser consequência das correlações utilizadas para avaliação da fração de vazio no leito e emulsão, que podem estar produzindo resultados subestimados, ou não sejam aplicáveis aos casos simulados.

As Figuras 6.13 à 6.16 apresentam resultados das distribuições granulométricas de alimentação e obtidas por simulação das espécies sólidas presente no leito e elutriado dos testes 19 a 22.

Nos itens (a), das Figuras 6.13 à 6.16, são apresentadas as distribuições granulométricas de núcleos de carvão de alimentação, e os obtidos por simulação no leito e no elutriado. Nota-se na distribuição dos núcleos de carvão no leito a presença de núcleos da classe *critical fines*, os quais não são elutriados por estarem contidos no interior das partículas de cinzas. Sua distribuição no elutriado é dominada por núcleos da classe *critical fines* e *small* contidos em partículas de cinzas elutriadas nas classes *smalls* e *larges* (ver itens b).

Nos itens (b), das Figuras 6.13 à 6.16, são mostradas as distribuições granulométricas das cinzas de alimentação, e as obtidas por simulação no leito e no elutriado. Percebe-se no perfil granulométrico das cinzas no leito a ausência de partículas da classe *critical fines*, as quais são instantaneamente elutriadas quando alimentadas ou geradas no leito. Nota-se na distribuição granulométrica das cinzas no elutriado, que as partículas dominantes são em sua maioria da classe *critical fines* e com frações reduzidas de partículas *smalls* e *larges*.

As Figuras 6.14 e 6.16, itens (c), apresentam as distribuições granulométricas do calcário de alimentação, e os simulados para o leito e elutriado. O seu comportamento é semelhante ao das cinzas, e tem as mesmas explicações.

Para comparar os resultados das distribuições granulométricas de simulação com os experimentais, determina-se a porcentagem mássica de particulado no leito obtido por simulação em cada faixa de peneiras utilizadas no levantamento do perfil experimental, dado por:

$$X_{i,leito} = M.X_a \int_{D_i/2}^{D_{i+1}/2} P_a(r)dr + M.X_l \int_{D_i/2}^{D_{i+1}/2} P_l(r)dr \quad (6.2)$$

Sendo,

$X_{i,leito}$ Fração mássica de material do leito retido entre duas peneiras consecutivas no leito i e $i+1$, *adimensional*.

D_i Diâmetro da peneira i , *m*.

Considera-se na equação (6.2) que a massa de núcleos de carvão no leito seja desprezível em comparação com as massas de cinzas ou de cinzas e calcário (Tabela 6.7).

Para obtenção da porcentagem mássica de particulado no elutriado obtido por simulação, assume-se que os núcleos de carvão no elutriado sejam provenientes, em sua grande maioria, das partículas *critical fines* do carvão de alimentação. Logo, a fração de particulado no elutriado obtido por simulação em cada faixa de peneiras é dada como:

$$X_{i,elutriado} = \frac{F_{e,c} \int_{D_i/2}^{D_{i+1}/2} P_{e,c}(r)dr + F_{e,a} \int_{D_i/2}^{D_{i+1}/2} P_{e,a}(r)dr + F_{e,l} \int_{D_i/2}^{D_{i+1}/2} P_{e,l}(r)dr}{F_{e,c} + F_{e,a} + F_{e,l}} \quad (6.3)$$

Sendo,

$X_{i,elutriado}$ Fração mássica de material elutriado retido entre duas peneiras consecutivas i e $i+1$, *adimensional*.

Distribuição granulométrica das partículas por espécie (l/m) x Diâmetro da partícula (μm)
[Teste 19-Simulação]

a) Núcleos de carvão

b) Cinzas

Figura 6.13 – Perfis das distribuições granulométricas dos núcleos carbonáceos e cinzas, no leito e elutriado, obtidos por simulação para o teste 19.

Distribuição granulométrica das partículas por espécie (l/m)x Diâmetro da partícula (μm)
[Teste 20- Simulação]

a) Núcleos de carvão

b) Cinzas

c) Calcário

Figura 6.14 - Perfis das distribuições granulométricas dos núcleos carbonáceos, cinzas e calcário, no leito e elutriado, obtidos por simulação para o teste 20.

Distribuição granulométrica das partículas por espécie (l/m)x Diâmetro da partícula (μm)
[Teste 21-Simulado]

a) Núcleos de carvão

b) -Cinzas

Figura 6.15 - Perfis das distribuições granulométricas dos núcleos carbonáceos e cinzas, no leito e elutriado, obtidos por simulação para o teste 21.

Distribuição granulométrica das partículas por espécie (l/m)x Diâmetro da partícula (μm)

[Teste 22-Simulado]

a) Núcleos de carvão

b) Cinzas

c) Calcário

Figura 6.16 - Perfis das distribuições granulométricas dos núcleos carbonáceos, cinzas e calcário, no leito e elutriado, obtidos por simulação para o teste 22.

As Figuras 6.17 à 6.20 apresentam as comparações dos perfis granulométricos no leito, item A, e elutriado, item B, obtidos por simulação e experimentalmente para os testes 19 a 22. Nota-se em todas as comparações que os resultados simulados e experimentais são discordantes.

Observa-se nos resultados experimentais dos testes 19 e 21, onde se utilizou somente carvão na alimentação, que o perfil granulométrico do particulado no leito teve um grande deslocamento para a esquerda quando comparado com o perfil do carvão de alimentação A simulação não mostra este deslocamento. Esta discrepância pode ser consequência de taxas de atrito das cinzas subestimadas, da desconsideração de efeitos da fragmentação das partículas de cinzas, e/ou de modelo de arrasto e elutriação descalibrado.

Nos resultados experimentais dos testes 20 e 22, realizados com o uso adicional do calcário na alimentação, percebe-se que a adição de calcário provoca um menor deslocamento para a esquerda do perfil granulométrico do particulado no leito quando comparado com os resultados dos testes 19 e 21. Isso ocorre devido ao fato do calcário de alimentação possuir um maior tamanho médio de partículas em relação ao carvão, permitindo a presença no leito de partículas de calcário de bitolas maiores.

As discordâncias observadas nos perfis granulométricos do particulado no elutriado obtidos por experimentação e simulados são possivelmente devidas às escolhas das constantes e parâmetros utilizados, como o máximo raio dos *critical fines*, os parâmetros do modelo de arraste e elutriação, e das constantes da distribuição *Rosin-Rammler* dos finos gerados por atrito das cinzas e calcário. Nenhum destes foi ajustado aos dados empíricos do reator e particulado utilizados.

[Teste 19]

(A)

(B)

Figura 6.17 – Comparações dos resultados do modelo com dados empíricos dos perfis das distribuições granulométricas no leito (A) e no elutriado (B) do teste 19. Diâmetros médios superficiais: $D_{m,sup} = 295 \mu m$ (empírico - leito), $D_{m,sup} = 514 \mu m$ (simulado - leito); $D_{m,sup} = 40 \mu m$ (empírico - elutriado), $D_{m,sup} = 33 \mu m$ (simulado - elutriado).

[Teste 20]

(A)

(B)

Figura 6.18 - Comparações dos resultados do modelo com dados empíricos dos perfis das distribuições granulométricas no leito (A) e no elutriado (B) do teste 20. Diâmetros médios superficial: $D_{m,sup} = 305 \mu m$ (empírico-leito), $D_{m,sup} = 550 \mu m$ (simulado-leito); $D_{m,sup} = 32 \mu m$ (empírico - elutriado), $D_{m,sup} = 69 \mu m$ (simulado - elutriado).

[Teste 21]

(A)

(B)

Figura 6.19 - Comparações dos resultados do modelo com dados empíricos dos perfis das distribuições granulométricas no leito (A) e no elutriado (B) do teste 21. Diâmetros médios superficial: $D_{m,sup} = 247 \mu m$ (empírico - leito), $D_{m,sup} = 527 \mu m$ (simulado - leito); $D_{m,sup} = 41 \mu m$ (empírico - elutriado), $D_{m,sup} = 30 \mu m$ (simulado - elutriado).

[Teste 22]

(A)

(B)

Figura 6.20 - Comparações dos resultados do modelo com dados empíricos dos perfis das distribuições granulométricas no leito (A) e no elutriado (B) do teste 22. Diâmetros médios superficial: $D_{m,sup} = 356 \mu m$ (empírico - leito), $D_{m,sup} = 559 \mu m$ (simulado - leito); $D_{m,sup} = 40 \mu m$ (empírico - elutriado), $D_{m,sup} = 25 \mu m$ (simulado - elutriado).

6.2.3 Eficiência de absorção de enxofre.

A Tabela 6.9 apresenta os resultados experimentais e de simulação das concentrações de descarga de SO_2 , O_2 e da eficiência de absorção de enxofre dos testes 1 a 22. O teste 1, 6, 11, 19 e 21 são os testes zeros onde se utilizou somente carvão na alimentação.

Tabela 6.9 – Comparação das concentrações de gases de descarga do reator e as eficiências de absorção de enxofre simuladas e experimentais dos testes 1 a 22.

Teste	Empírico			Simulado		
	C_{F,SO_2}^* (ppm)	C_{F,O_2}^* (%Vol.)	n_{SO_2} (%)	C_{F,SO_2}^* (ppm)	C_{F,O_2}^* (%Vol.)	n_{SO_2} (%)
1	1594	6,97	-	1584	7,16	
2	420	7,62	73,65	724	6,97	54,26
3	253	6,97	84,13	467	6,81	70,47
4	228	7,33	85,70	322	6,53	79,65
5	188	7,36	88,21	267	6,52	83,16
6	1241	7,52	-	1755	5,54	
7	660	7,55	46,82	728	6,79	58,54
8	458	6,91	63,09	473	6,64	73,06
9	234	7,34	81,14	320	6,61	81,79
10	195	7,11	84,29	246	6,59	85,97
11	1946	3,48	-	1989	3,63	
12	698	3,39	64,13	811	3,65	59,24
13	402	3,54	79,34	494	3,65	75,14
14	206	3,45	89,41	355	3,85	82,13
15	126	3,24	93,53	278	3,84	86,00
15	250	2,10	87,15	284	2,44	85,71
16	320	1,80	83,56	292	0,71	85,29
18 ^b	180	0,60	90,75	303	0,00	84,76
19 ^c	1743	0,92	-	2629	0,00	
20 ^c	479	0,54	72,52	808	0,00	69,25
21 ^c	1183	2,88	-	2079	2,92	
22 ^c	312	2,66	64,98	521	2,77	74,91

Define-se a eficiência de absorção de enxofre pelo calcário, n_{SO_2} , como:

$$n_{SO_2} = \frac{C_{F,SO_2}^{sc} - C_{F,SO_2}^{cc}}{C_{F,SO_2}^{sc}} \quad (6.4)$$

Sendo,

C_{F,SO_2}^{sc} Concentração de SO_2 na saída do *freeboard* para processo sem utilização de calcário, *ppm*.

C_{F,SO_2}^{cc} Concentração de SO_2 na saída do *freeboard* para processo com utilização de calcário, *ppm*.

As Figura 6.21 à 6.23 apresentam, respectivamente, comparações das concentrações de descargas de O_2 , SO_2 e da eficiência de absorção de enxofre simuladas e obtidas experimentalmente.

Nota-se que a concentração de descarga de oxigênio é bem simulada pelo modelo, exceto para as condições redutoras e com baixo excesso de ar ($\phi \geq 0,90$). Isso ocorre devido às simplificações dos mecanismos de reação envolvendo a oxidação do monóxido de carbono, que foram consideradas instantâneas.

Percebe-se na Figura 6.22 que as concentrações finais de SO_2 são superestimadas pelo modelo, principalmente nas comparações de resultados dos testes realizados neste trabalho (19 a 22). As discrepâncias encontradas podem ser explicadas pela real fração de enxofre presente no carvão utilizado. Apesar destas discrepâncias, pode-se concluir a partir da Figura 6.3 que a eficiência de absorção de enxofre é corretamente simulada, com desvios até modestos quando se considera que inúmeras correlações e parâmetros utilizados no modelo não foram ajustados às respectivas condições experimentais praticadas.

Figura 6.21 – Comparação das concentrações de descargas de O_2 simuladas e experimentais dos testes 1 a 22.

Figura 6.22 - Comparação das concentrações de descargas de SO_2 simuladas e experimentais dos testes 1 a 22.

Figura 6.23 - Comparação da eficiência de absorção de enxofre simuladas e experimentais dos testes 1 a 22.

CAPITULO 7 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES.

7.1 Conclusões

Nota-se nas comparações realizadas entre os dados de simulação e experimentais as seguintes conclusões:

- Observa-se uma boa concordância entre os perfis simulados das concentrações de SO_2 e O_2 no leito para todos os testes, com exceção do teste 19. Entretanto, existem discordâncias quantitativas, com as simulações superestimando os dados experimentais, as quais podem ser consequência de coeficientes de taxa de reação subestimados, elutriação excessiva, sangria excessiva, ou da desconsideração de possíveis processos reativos como a queima de voláteis na emulsão. No teste 19, onde ocorreu tanto discordância quantitativa como qualitativa, existe a complexidade adicional da condição redutora utilizada, como ocorrido também no teste 20. Porém, a presença de calcário neste teste evidenciou que os mecanismos de reação envolvendo a oxidação do monóxido de carbono tornaram-se menos relevantes;
- Nota-se que os perfis das concentrações de SO_2 no *freeboard* são superestimados pelo modelo, sendo uma das possíveis causas a falta de conhecimento da real fração de enxofre presente no carvão utilizado nos testes experimentais, e que é um parâmetro de entrada do modelo. Os perfis das concentrações de O_2 ao longo da altura do *freeboard* simulados e experimentais são discordantes devido as simplificações das reações químicas assumidas, incluindo a imediata queima dos voláteis. Observa-se apesar disso, que as concentrações de descargas de O_2 são bem simuladas pelo modelo, exceto para as condições redutoras e com baixo excesso de ar ($\phi \geq 0,90$);
- Percebe-se que a massa do leito nas simulações com calcário é subestimada pelo modelo, sendo notado o mesmo efeito qualitativo de diminuição da massa

do leito com aumento da velocidade de fluidização nas simulações dos testes com o uso apenas de carvão na alimentação. Essas discrepâncias podem ser conseqüências das correlações utilizadas para avaliar a fração de vazio no leito e emulsão, que podem não ser aplicáveis aos casos simulados.

- Observa-se nas comparações dos resultados experimentais e simulados dos perfis granulométricos do particulado no leito com uso apenas do carvão na alimentação, que os experimentos mostraram um grande deslocamento de perfil para a esquerda não observada nas simulações. Esta discrepância pode ser conseqüência de taxas de atrito das cinzas subestimadas, da desconsideração de efeitos de fragmentação da partícula, e/ou modelos de arrasto e elutriação descalibrados;
- Nota-se discordâncias quantitativas e qualitativas dos perfis granulométricos do particulado no elutriado obtidos por simulação e experimentação. Essas discordâncias são causadas possivelmente pelas escolhas de parâmetros e constantes que não estão ajustadas aos dados empíricos do reator e particulado utilizados;
- Apesar das varias discrepâncias observadas entre as simulações e os dados experimentais, percebe-se que a eficiência de absorção de enxofre é corretamente simulada, com desvios até modestos quando se considera que diversas correlações e parâmetros utilizados pelo modelo não foram ajustados às condições experimentais praticadas.

Em suma, a grande lição apresentada neste trabalho é que modelos fenomenológicos requerem calibrações específicas para cada caso simulado na forma de correlações apropriadas e ajustes de parâmetros do modelo. Embora o presente modelo apresente boas concordâncias da eficiência de absorção de enxofre, estes resultados devem ser tratados com cautela; Percebe-se pelas comparações dos perfis das concentrações de gases das distribuições granulométricas do particulado no leito e elutriado, e até pela própria massa do leito, que as boas eficiências de absorção de enxofre observadas são possivelmente resultados de compensação de erros, sobrepostos e propagados devido ao uso de parâmetros e correlações muitas vezes não aplicáveis aos casos simulados neste trabalho.

7.2 Sugestões

Baseado na experiência adquirida durante o presente estudo, as seguintes sugestões são feitas para futuros trabalhos.

Em relação ao modelo fenomenológico:

- Sugere-se a inclusão de novos mecanismos de reação para a oxidação do monóxido de carbono gerado na combustão do carvão seco devolatilizado e na queima dos voláteis do carvão; Além da inclusão da análise para outros gases poluentes e de interesse como NO_x ;
- O modelo para determinação das concentrações gasosas no *freeboard* pode ser estendido para um modelo de duas dimensões;
- A inclusão de um modelo térmico para avaliação das eficiências térmicas do reator;
- Ampliar o modelo de distribuições granulométricas do particulado para outros efeitos interpartículas como a fragmentação;

Em relação a trabalhos experimentais:

- Estudar e desenvolver correlações para o modelo de taxa de arraste e elutriação para o reator piloto do NETeF, como também dos coeficientes de taxa de atrito do carvão e calcário, tamanho dos finos elutriados e de seus respectivos coeficientes de ajuste da distribuição de *Rosin-Rammler*;
- Estudar e desenvolver mapas de regime de combustão do coeficiente global de taxa de reação de combustão de carvão para caracterização das regiões de domínio cinético-químico, difusividade em poros e/ou difusividade externa à partícula;

- Estudar e desenvolver correlação para o coeficiente de taxa de reação intrínseca do calcário a partir de ensaios de batelada, e obter os perfis do decaimento do coeficiente de taxa de reação intrínseca ao longo do tempo;
- Estudar e comparar os comportamentos da queima do carvão com o carvão seco devolatilizado em reatores de bancada;
- Estudar possíveis efeitos de fragmentação do carvão CE-4500 e caracterizar esse comportamento.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ADÁNEZ, J. et al. (1992). Carbon efficiency in atmospheric fluidized bed combustion of lignites. **Fuel**, v. 71, p. 417-424.

AGARWAL, P. K.; LA NAUZE, R. D. (1989). Transfer process local to the coal particle: A review of drying, devolatilization and mass transfer in fluidized bed combustion. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 67, p. 457-480.

ALAGÖZ, D. E. (2006). **Mathematical modeling of fluidized bed combustors with radiation model**. Dissertação (mestrado). Middle east technical university. Ankara.

ALTINDAG, H.; GOGEBAKAN, Y.; SELÇUK. (2004). Sulfur capture for fluidized-bed combustion of high-sulfur lignites. **Applied Energy**, v. 79, p. 403-424.

ANDERSSON, B. A.; LECKNER, B. Particle mass flux in the freeboard of a fluidized bed boiler. **Powder Technology**, v. 58, p. 25-37, 1989.

ARENA, U.; D'AMORE, M.; MASSIMILLA, L. (1983). Carbon attrition during the fluidized combustion of Coal. **AIChE Journal**, v. 29, n. 1, p. 40-48.

AVEDESIAN, M. M.; DAVIDSON, J. F. Combustion of carbon particles in a fluidised bed. **Transactions of the Institution of Chemical Engineers**, v. 51, p. 121-131, 1973.

ÁVILA, I. (2008). **Um estudo da sorção de SO₂ por cálcio em analisador termogravimétrico e na combustão de carvão em leito fluidizado**. 296 f. Tese (Doutorado) Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2008.

BARACHOVCHIN, D. M.; BEER, J. M.; SAROFIM, A. F. (1981). An investigation into the steady-state elutriation of fines from a fluidized bed. **AIChE Symposium Series**, v. 77, n. 205, p. 76-75.

BARON, E. A. (1990). Effect of bed height on particle entrainment from gas-solid fluidized beds. **Powder Technology**, v. 63, p. 149-156.

BÉER, J. M.; MASSIMILLA, L.; SAROFIM, A. F. (1980). Fluidized coal combustion: The effect of coal type on carbon load and carbon elutriation. **Institution of Energy Symposium Series**, v. 4, p. IV5/1-IV5/10.

BORGHI, G.; SAROFIM, A. F.; BEÉR, J. M. (1985). A model of coal devolatilization and combustion in fluidized beds. **Combustion and Flames**, v. 61, p. 1-16.

BREM, G. (1995). Overall modeling. In: VALK, M. **Atmospheric fluidized bed coal combustion**. Amsterdam: Elsevier, cap. 5, p. 185-225.

BRIENS, C. L.; BERGOUNOU, M. A.; BARON, T. (1988). Prediction of entrainment from gas-solid fluidized beds. **Powder Technology**, v. 54, p. 183-196.

BUKUR, D.; AMUNDSON, N. R. (1982). Fluidized bed char combustion kinetic models. **Chemical Engineering Science**, v. 37, n.1, p. 17-25.

CHANDRAN, R. R.; DUQUM, J. N. (1989). Attrition characteristics relevant for fluidized-bed combustion. In: GRACE, J. R.; SHEMILT, L. W. **Fluidization VI**. United States: American Institute of Chemical Engineers, p. 571- 580.

CHEN, T. P.; SAXENA, S. (1977). Mathematical modelling of coal combustion in fluidized beds with sulphur emission control by limestone or dolomite. **Fuel**, v. 56, p. 401-413.

CHEN, T. P.; SAXENA, S. C. (1978). A mechanistic model applicable to coal combustion in fluidized beds. **AIChE Symposium Series**, v. 74, n. 176, p. 149-161.

CHEN, Z. et al. (2001). Mathematical modeling of fluidized bed combustion 4: N₂O and NO_x emissions from the combustion of char. **Fuel**, v. 80, p. 1259-1272.

CLIFT, R. (1986). Hydrodynamics of bubbling fluidized beds. In: GELDART, D. **Gas Fluidization Technology**. Wiley, New York: John Wiley & Sons Ltd., p. 53-96.

CLIFT, R.; GRACE, J. R. (1971). Coalescence of bubbles in fluidized beds. **AIChE Symposium Series**, v. 67, n. 116, p. 23-33.

CONGALIDIS, J. P.; GEORGAKIS, C. (1981). Multiplicity patterns in atmospheric fluidized bed coal combustors. **Chemical Engineering Science**, v. 36, n. 9, p. 1529-1546.

COSTA, M. C. D. (2000). **Efeito da temperatura sobre a conversão e o coeficiente de taxa de reação e absorção de SO₂ por calcários em reator de leito fluidizado**. 174 f. Dissertação (Mestrado), Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2000.

COSTA, M. C. D. (2005). **Emissões poluentes na combustão em leitos fluidizados de carvão mineral**. 114 f. Tese (Doutorado), Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2005.

CRNKOVIC, P. C. G. M. (2003). **Análise termogravimétrica para determinação de fatores que afetam a eficiência de sorção de SO₂ por calcários na combustão de carvões**. 127 f. Tese (Doutorado), Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2003.

DARTON, R. C. (1979). A bubble growth theory of fluidized bed reactors. **Transactions of the Institution of Chemical Engineers**, v. 57, p. 134-138.

DARTON, R. C. et al. (1977). Bubble growth due to coalescence in fluidized beds. **Transactions of the Institution of Chemical Engineers**, v. 55, p. 274-280.

DAVIDSON, J. F.; HARRISON, D. (1963). **Fluidized particles**. New York: Cambridge University Press.

DENNIS, J. S.; HAYHURST, A. N. (1990). Mechanism of the sulphation of calcined limestone particles in combustion gases. **Chemical Engineering Sciences**, v. 45, n. 5, p. 1175-1187.

DONSI, G.; MASSIMILLA, L.; MICCIO, M. (1981). Carbon fines production and elutriation from the bed of fluidized coal combustor. **Combustion and Flame**, v. 41, p. 57-69.

DURÃO, D. F. G. et al. (1990). Combustion kinetics of high-ash coals in fluidized beds. **Combustion and Flame**, v. 79, p. 162-74.

DURÃO, D. F. G.; FERRÃO, P.; HEITOR, M. V. (1989). On modelling the burning of a high-ash coal in a fluidized bed. **Combustion Science and Technology**, v. 64, p. 81-95.

ENGELLEN, A. B. V.; HONING, G. V. D. (1995). Coal characterization. In: VALK, M. **Atmospheric fluidized bed coal combustion**. Amsterdam: Elsevier, p. 277-290.

FIELD, M. A. et al. (1967). **Combustion of pulverised coal**. The British Coal Utilization Research Association. Leatherhead.

FOUDA, A. E.; CAPES, C. E. (1976). Calculation of large numbers of terminal velocities or equivalent particles diameters using polynomial equation fitted to the Heywood tables. **Powder Technology**, v. 13, p. 291-293.

FUNG, A. S.; HAMDULLAPUR. (1993b). Effect of bubble coalescence on entrainment in gas fluidized beds. **Powder Technology**, v. 77, p. 251-265.

GAVRONSKI, J. D. (2007). **Carvão mineral e as energias renováveis no Brasil**. Dissertação de mestrado. Universidade Federal do Rio Grande do Sul. UFRG. Porto Alegre, p. 290.

GELDART, D. (1986a). Single particles, fixed and quiescent beds. In: GELDART, D. **Gas Fluidization Technology**. Wiley, New York: John Wiley & Sons Ltd., p. 11-32.

GELDART, D. (1986b). Particle Entrainment and carryover. In: GELDART, D. **Gas Fluidization Technology**. Wiley, New York: John Wiley & Sons Ltd., p. 123-153.

GELDART, D.; POPE, D. J. (1983). Interaction of fine and coarse particles in the freeboard of a fluidized bed. **Powder Technology**, v. 34, p. 95-97.

GEORGE, S. E.; GRACE, J. R. (1978). Entrainment of particles from aggregative fluidized bed. **AIChE Journal**, v. 74, n. 176, p. 67-73.

GORDON, A. L.; AMUNDSON, N. R. (1976). Modelling of fluidized bed reactors - IV combustion of carbon particles. **Chemical Engineering Science**, v. 31, p. 1163-1178.

GORDON, A. L.; CARAM, H. S.; AMUNDSON, N. R. (1978). Modelling of fluidized bed reactors - V Combustion of carbon particles - an extension. **Chemical Engineering Sciences**, v. 33, p. 713-722.

HAMEL, S.; KRUMM, W. (2001). Mathematical modelling and simulation of bubbling fluidised bed gasifiers. **Powder Technology**, v. 120, p. 105-112.

HATANO, H.; ISHIDA, M. (1981). The entrainment of solid particles from a gas-solid fluidized bed. **Journal of Chemical Engineering of Japan**, v. 14, n. 4, p. 306-311, 1981.

HATANO, H.; ISHIDA, M. (1983). Study on the entrainment of FCC particles from a fluidized bed. **Powder Technology**, v. 35, p. 201-209.

HATANO, H.; OKUMA, T.; ISHIDA, M. (1984). Bubble eruption model for entrainment phenomena below the TDH for gas-solid fluidized beds. **Journal of Chemical Engineering of Japan**, v. 17, n. 5, p. 491-497.

HORIO, M. et al. (1985). Behaviour of Entrained particles in freeboard. In: KWAUK, M. E. A. **Fluidization`85: science and technology**. Beijing: Science Press, p. 124-135.

HUILIN, L. et al. (1999). Modeling of coal combustion in a 25-MW FBC power plant. **Energy**, v. 24, p. 199-208.

ISHIDA, M.; NISHIWAKI, A.; SHIRAI, T. (1980). Movement of solid particles around bubbles in a three-dimensional fluidized bed at high temperatures. In: GRACE, J. R.; MATSEN, J. M. **Fluidization**. New York: Plenum Press, p. 357-364.

KHAN, W. Z.; GIBBS, B. M. (1996). SO_x emissions from a fluidized-bed combustor with and without limestone addition. **Energy**, v. 21, n. 2, p. 105-113.

KULASEKARAN, S.; LINJEWILE, T.; AGARWAL, P. K. (1999). Mathematical modeling of fluidized bed combustion 3 simultaneous combustion of char and combustible gases. **Fuel**, v. 78, p. 403-417.

KUNNI, D. L.; LEVENSPIEL, O. (1969). **Fluidization engineering**. New York: John Wiley & Sons.

LA NAUZE, R. D.; JUNG, K. (1982). **The kinetics of combustion of petroleum coke particles in a fluidized-bed combustors**. 19. ed. Pittsburgh, p. 1087--1092.

LEMCOFF, N. O. (1988). Fluidized bed combustion of high ash chars. **Combustion Science and Technology**, v. 62, p. 131-147.

LEWIS, W. K.; GILLILAND, E. R.; LANG, P. M. (1962). Entrainment from fluidized beds. **Chemical Engineering Process Symposium Series**, v. 58, n. 38, p. 65-78.

LIN, W. et al. (1993). Modelling SO_2 and NO_x emissions in fluidized bed combustion of coal. **Fuel**, v. 72, p. 299-304.

MERRICK, D.; HIGHLEY, J. (1974). Particle size reduction and elutriation in a fluidized bed process. **AIChE Symposium Series**, v. 70, n. 137, p. 366-378.

MICHELS JR., V. (2004). **Influência da temperatura na absorção de SO_2 por calcários na combustão em leito fluidizado de carvão mineral**. 111 f. Dissertação (Mestrado), Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2004.

MILIOLI, F. E. (1991). **A Model for particle size distribution and elutriation in fluidized beds**. Tese (Doutorado) - University of Sheffield. Sheffield, p. 229.

MILIOLI, F. E. (1998). **Modelagem matemática da combustão em leito fluidizado de carvões minerais brasileiros I : Absorção de SO_x por calcário**. Universidade de São Paulo, São Carlos (FAPESP 1996/2816-9).

MILIOLI, F. E.; FOSTER, P. J. (1995a). A model for particle size distribution and elutriation in a fluidized beds. **Powder Technology**, v. 83, p. 265-280.

MILIOLI, F. E.; FOSTER, P. J. (1995b). Entrainment and elutriation modeling in fluidized beds. **Powder Technology**, v. 83, p. 233-243.

MORITA, E. D. S. (2009). **Estudo experimental das emissões de NO_x na combustão de carvão mineral brasileiro em leito fluidizado rápido**. 186 f. Dissertação (Mestrado), Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade de Campinas, Campinas, 2009.

MOROOKA, S.; KAWAZUISHI, K.; KATO, Y. (1980). Holdup and flow pattern of solid particles in freeboard of gas-solid fluidized bed with fine particles. **Powder Technology**, v. 26, p. 75-82.

MORSI, S. A.; ALEXANDER, A. J. (1972). An investigation of particles trajectories in two phase flow systems. **Journal Fluid Mechanics**, v. 55, parte 2, p. 193-208.

NIKLAASSON, F. et al. (2002). Estimation of solids mixing in a fluidized bed combustor. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 41, p. 4663-4673.

O'NEIL, P. V. (1987). **Advanced engineering mathematics**. 2. ed. California: Wadsworth Publishing CO.

OVERTURF, B. W.; REKLAITIS, G. V. (1983). Fluidized-bed reactor model with generalized particles balances I- formulation and solution II-Coal combustion application. **AIChE Journal**, v. 29, n. 5, p. 813-829.

PAGLIUSO, J. D. (1994). **Determinação do coeficiente de transferência de calor em leito circulante: influência da distribuição granulométrica**. Tese (Doutorado), Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 1994.

PARK, D. (1989). Estimation of temperature difference between char particles and the fluidized bed in char combustion. **Fuel**, v. 68, p. 1320-1324.

PARK, D.; LEVENSPIEL, O.; FITZGERALD, T. J. (1981). Plume model for large particles fluidized-bed combustors. **Fuel**, v. 60, p. 295-306.

PARTRIDGE, B. A.; ROWE, P. N. (1966). Chemical reaction in a bubbling gas-fluidization. **Transactions of the Institution Chemical Engineers**, v. 44, p. T335-T348.

PEMBERTON, S. T.; DAVIDSON, J. F. (1986a). Elutriation from fluidized beds - I. Particle ejection from the dense phase into the freeboard. **Chemical Engineering Science**, v. 41, n. 2, p. 243-251..

PILLAI, K. K. (1981). The influence of coal type on devolatilization and combustion in fluidized beds. **Journal of the Institute of Energy**, v. 150, p. 142-152.

PIS, J. J. et al. (1991). Attrition of coal ash particles in a fluidized bed. **Powder Technology**, v. 66, p. 41-46.

RAJAN, R. R.; WEN, C. Y. (1980). A comprehensive model for fluidized bed coal combustors. **AIChE Journal**, v. 26, n. 4, p. 642-655.

RAJAN, R.; KRISHNAN, R.; WEN, C. Y. (1978). Simulation of fluidized bed combustors. Part II. Coal Devolatilization and sulfur oxides retention. **AICHE Symposium Series**, v. 74, n. 176, p. 112-119.

REDDY, G. V.; SINHA, A. (1997). A mathematical model for coal combustion in a 10-MW FBC power plant. **Energy**, v. 22, n. 4, p. 381-387.

REDIVO, R. V. (2002). **Caracterização tecnológica do carvão das camadas barro branco e bonito para fins energéticos na região de Criciúma-SC**. 82 f. Dissertação (Mestrado), Escola de Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2002.

ROSS, I. B.; DAVIDSON, J. F. (1981). The combustion of carbon particles in a fluidised bed. **Transactions of the Institution Chemical Engineers**, v. 59, p. 108-114.

SAMANIEGO, J. E. L. **Efeito da concentração de SO_2 sobre a conversão e o coeficiente global de taxa de reação na absorção por calcário em reator de leito fluidizado**. 116 f. Dissertação (Mestrado), Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2003.

SAROFIM, A.; BEÉR, J. (1978). **Modelling of fluidized bed combustion**. Proceedings of the 17th Symposium (Internationa) on Combustion. [S.l.]: [s.n.], p. 189-204.

SILVA, F. F. (2003). **Efeito da distribuição granulométrica do calcário na absorção de SO_2 em reator de leito fluidizado**. 114 f. Dissertação (Mestrado), Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2003.

SMITH, I. A. (1978). The intrinsic reactivity of carbon to oxygen. **Fuel**, p. 409-414.

SOUZA-SANTOS, M. L. D. (1989). Comprehensive modelling and simulation of fluidized bed boilers and gasifiers. **Fuel**, v. 68, p. 1507-1521.

SRINIVASAN, R. A. et al. (1998). Mathematical modeling of fluidized bed combustion - 2: combustion of gases. **Fuel**, v. 77, n. 9/10, p. 1033-1049.

SRIRAMULU, S. et al. (1996). Mathematical modelling of fluidized bed combustion 1. combustion of carbon in bubbling beds. **Fuel**, v. 75, n. 12, p. 1351-1362.

STUBINGTON, J. F.; BARRET, D.; LOWRY, G. (1984). Bubble size measurements and correlation in a fluidised bed at high temperatures. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 62, p. 173-178.

TOMECZEK, J.; MOCEK, P. (2007). Attrition of coal ash particles in a fluidized-bed reactor. **AIChE Journal**, v. 53, n. 5.

TOOMEY, R. D.; JOHNSTONE, H. F. (1952). Gaseous fluidization of solids particles. **Chemical Engineering Progress**, v. 48, n. 5, p. 220-226.

TREVIÑO, C.; HERRERA, C.; GARCIA-YBARRA, P. (1990). Stability analysis of simplified model of a fluidized bed combustor. **Combustion and Flame**, v. 81, p. 399-411.

TURESO, J. P. (2004). **Estudo de uma planta piloto para combustão em leito fluidizado de carvões minerais brasileiros**. 118 f. Tese (Doutorado), Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2004.

WALSH, P. M.; MAYO, J. E.; BEER, J. M. (1984). Refluxing particles in the freeboard of a fluidized bed. **AIChE Symposium Series**, v. 80, n. 234, p. 119-128.

WEN, C. Y.; CHEN, L. H. (1982). Fluidized bed freeboard: Entrainment and elutriation. **AIChE Journal**, v. 28, n. 1, p. 117-128, jan.

WEN, C. Y.; YU, Y. H. (1966a). A generalized method for predicting the minimum fluidization velocity. **AIChE Journal**, v. 12, n. 3, p. 610-612.

WEN, C. Y.; YU, Y. H. (1966b). Mechanics of fluidization. **Chemical Engineering Symposium Series**, v. 62, p. 100-111.

XAVIER, A. M.; LEWIS, D. A.; DAVIDSON, J. F. (1978). The expansion of bubbling fluidised beds. **Transactions of the Institution Chemical Engineers**, v. 56, p. 274-280.

ZENZ, F. A.; WEIL, N. A. (1958). A theoretical-empirical approach to the mechanism of particle entrainment from fluidized beds. **AIChE Journal**, v. 4, n. 4, p. 472-479.

APÊNDICE A - MODELAGEM DAS TAXAS DE REAÇÕES QUÍMICAS HETEROGÊNEAS

Neste apêndice desenvolve-se modelagem para as taxas de reações químicas heterogêneas de interesse, que ocorrem no processo de combustão em leito fluidizado de carvões minerais com altos teores de cinzas e enxofre com absorção dos gases de enxofre por calcários. Adota-se que as reações químicas heterogêneas ocorram apenas na fase de emulsão, desprezando-se as possíveis reações heterogêneas que venham a ocorrer na região do *freeboard*.

Sabe-se que as partículas de carvão, ao serem introduzidas em um combustor, são submetidas inicialmente as etapas de secagem e devolatilização, e em seguida, a etapa de reação heterogênea do carvão seco. Na prática, as etapas de secagem e devolatilização são extremamente rápidas quando comparadas a combustão heterogênea (PILLAI, 1981; AGARWAL e LA NAUZE, 1989; PARK, 1989), e para efeitos de modelagem são consideradas instantâneas.

Processo semelhante ocorre com as partículas de calcário quando inseridas no reator. Inicialmente, o processo de calcinação ou decomposição térmica ocorre por um período de tempo desprezível quando comparado com a etapa subsequente da absorção de enxofre (COSTA, 2000; SAMANIEGO, 2003).

A.1 Taxa de combustão de carvões minerais com altos teores de cinzas

A taxa de combustão do carvão é estabelecida levando-se em conta a forma da combustão das partículas com altos teores de cinzas, onde se admite um encolhimento do núcleo carbonáceo descrito pelo modelo *shrinking core*.

Assume-se que as partículas de carvão sejam esféricas e de raio externo r variável apenas por atrito, e raio interno l do núcleo carbonáceo variável apenas pela reação química

heterogênea. Sejam $P_a(r)$ e $P_c(l)$, respectivamente, as funções densidade de probabilidade da distribuição granulométrica das cinzas e núcleos carbonáceos presentes no leito, sendo $r_{m,a}$ o máximo raio das partículas de cinzas e $l_{m,c}$ o máximo raio dos núcleos carbonáceos. Logo, para todas as partículas de carvão no leito temos $0 \leq r \leq r_{m,a}$ e $0 \leq l \leq l_{m,c}$.

Seja $R_{rea,c}(r,l)$ a taxa de combustão para partículas de carvão com raio externo das cinzas $r - \Delta r/2 \leq r \leq r + \Delta r/2$, e raio dos núcleos carbonáceos $l - \Delta l/2 \leq l \leq l + \Delta l/2$. Então, a taxa de combustão do carvão no leito para estas faixas de bitola resulta:

$$\left[\frac{R_{rea,c}(r,l) n_c(r,l)}{V_E} \right] \quad (A.1)$$

Sendo,

$R_{rea,c}(r,l)$ Taxa de combustão de partículas de carvão com raio externo das cinzas r e de raio interno do núcleo de carbonáceo l , $kmol/s$.

$n_c(r,l)$ Número de partículas de carvão no leito com raio externo da cinza r e raio interno do núcleo carbonáceo l , *adimensional*.

V_E Volume de emulsão, m^3 .

O volume da emulsão é dado por:

$$V_E = AH_{mf} \quad (A.2)$$

O número de partículas de carvão no leito com raio das cinzas no intervalo $r \pm \Delta r/2$ e raio de núcleos carbonáceos no intervalo $l \pm \Delta l/2$ é dado por:

$$n_c(r,l) = \frac{M_c(r,l)}{m_c(r,l)} \quad (A.3)$$

Sendo,

$M_c(r,l)$ Massa total de partículas de carvão no leito com raio externo da partícula r e raio interno do núcleo carbonáceo l , kg .

$m_c(r, l)$ Massa de uma partícula de carvão no leito com raio externo da partícula r e raio interno do núcleo carbonáceo l , kg.

A massa total de partículas de carvão no leito com raio das cinzas na faixa $r \pm \Delta r/2$ e raio dos núcleos carbonáceos na faixa $l \pm \Delta l/2$ é dada por:

$$M_c(r, l) = M_c P_c(l) P_a(r) \Delta r \Delta l \quad (\text{A.4})$$

Sendo,

M_c Massa total de carvão no leito incluindo cinzas e núcleos carbonáceos, kg.

A massa de uma única partícula de carvão com raio externo r e raio interno do núcleo carbonáceo l é fornecida como:

$$m_c(r, l) = \frac{4}{3} \pi \left[l^3 \rho_c + (r^3 - l^3) \rho_a \right] \quad (\text{A.5})$$

Sendo,

ρ_c Densidade aparente do carvão, kg/m^3 .

ρ_a Densidade aparente da matriz de cinzas, kg/m^3 .

Assim, a equação (A.3) é reescrita como:

$$n_c(r, l) = \frac{3}{4} \frac{M_c P_c(l) P_a(r) \Delta r \Delta l}{\pi \left[l^3 \rho_c + (r^3 - l^3) \rho_a \right]} \quad (\text{A.6})$$

E a equação (A.1) como:

$$\left\{ \frac{3M_c}{4\pi AH_{mf}} \frac{R_{rea,c}(r, l) P_c(l) P_a(r) \Delta r \Delta l}{\left[l^3 \rho_c + (r^3 - l^3) \rho_a \right]} \right\} \quad (\text{A.7})$$

Levando ao limite quando Δl e Δr tendem a zero, e integrando para todo r e l no leito, obtém-se a taxa de combustão de carvão no leito, que resulta:

$$R_{rea,c} = \frac{3M_c}{4\pi AH_{mf}} \int_{l=0}^{l=l_{m,c}} \int_{r=l}^{r=r_{m,a}} \frac{P_c(l)P_a(r)}{l^3 \rho_c + (r^3 - l^3) \rho_a} R_{rea,c}(r,l) dr dl \quad (A.8)$$

Na equação (A.8) as funções densidade de probabilidade associadas às distribuições granulométricas dos núcleos carbonáceos e de cinzas são determinadas através do modelo apresentado no capítulo 3. Porém, para a resolução desta equação, a taxa de combustão dos núcleos carbonáceos no interior das partículas de carvão, $R_{rea,c}(r,l)$, deve ser determinada.

Figura A. 1 - Esquema de queima da partícula de carvão com altos teores de cinzas, e as condições de contorno para concentrações de O_2 em torno do núcleo carbonáceo da partícula.

Para tal, considera-se uma partícula de carvão esférica de raio externo r e de raio interno do núcleo carbonáceo l , variável apenas por reação química. As resistências a combustão deste núcleo no meio fluidizado são devidos a (i) difusão do oxigênio através da fase de particulado e do filme envolvente da partícula de carvão, (ii) difusão do oxigênio através da matriz de cinza reagida envolvente do núcleo carbonáceo, e (iii) cinética das reações químicas heterogêneas na superfície do núcleo carbonáceo (Figura A.1).

Assumindo que a concentração de O_2 seja constante na fase de particulado e que os efeitos convectivos possam ser desprezados, tem-se um problema de difusão mássica radial descrito como:

$$\frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{dC_{O_2}(\xi)}{d\xi} \right) = 0 \quad (A.9)$$

Sendo,

ξ Distância radial, m .

$C_{O_2}(\xi)$ Concentração de oxigênio no raio ξ da partícula de carvão, $kmol/m^3$.

Para o transporte do oxigênio por difusão através do meio particulado e filme envolvente da partícula, caso (i), tem-se as seguintes condições de contorno:

$$\begin{cases} C_{O_2}(r) = C_{O_2,s} \\ C_{O_2}(\infty) = C_{O_2,p} \end{cases} \quad (A.10)$$

Neste caso, a solução da equação (A.9) é dada como:

$$C_{O_2}(\xi) = C_{O_2,p} - (C_{O_2,p} - C_{O_2,s}) \frac{r}{\xi} \quad (A.11)$$

Sendo,

$C_{O_2,p}$ Concentração de oxigênio na emulsão, $kmol/m^3$.

$C_{O_2,s}$ Concentração de oxigênio na superfície externa da partícula de carvão, $kmol/m^3$.

A descarga molar de oxigênio na superfície da partícula de carvão é dada pela lei de Fick como:

$$J_{O_2} = (4\pi r^2) D_{E,O_2} \left(\frac{dC_{O_2}}{d\xi} \right)_{\xi=r} \quad (A.12)$$

Sendo,

J_{O_2} Descarga molar difusiva de O_2 na superfície externa de uma partícula de carvão, $kmol/s$.

Como o coeficiente de difusão efetivo do oxigênio no meio particulado dado pela equação (3.106), e considerando a equação (A.11), a equação (A.12) pode ser reescrita como:

$$J_{O_2} = 2\pi r Sh D_g (C_{O_2,p} - C_{O_2,s}) \quad (A.13)$$

Considera-se agora o transporte difusivo do oxigênio através da matriz de cinzas reagidas da partícula de carvão, onde as condições de contorno são:

$$\begin{cases} C_{O_2}(r) = C_{O_2,s} \\ C_{O_2}(l) = C_{O_2,l} \end{cases} \quad (A.14)$$

Neste caso, a solução da equação (A.9) torna-se:

$$C_{O_2}(\xi) = C_{O_2,s} - \frac{(C_{O_2,s} - C_{O_2,l})}{\left(\frac{1}{l} - \frac{1}{r}\right)} \left(\frac{1}{\xi} - \frac{1}{r}\right) \quad (A.15)$$

Sendo,

$C_{O_2,l}$ Concentração de oxigênio na interface da matriz de cinzas e do núcleo carbonáceo, $kmol/m^3$.

A descarga de O_2 na superfície do núcleo é dada pela lei de *Fick* como:

$$J_{O_2} = (4\pi l^2) D_a \left(\frac{dC_{O_2}}{d\xi} \right)_{\xi=l} \quad (A.16)$$

Sendo,

D_a Coeficiente de difusão molecular dos gases através da camada de cinzas, m^2/s .

Compondo as equações (A.15) e (A.16) tem-se:

$$J_{O_2} = \frac{4\pi D_a}{\left(\frac{1}{l} - \frac{1}{r}\right)} (C_{O_2,s} - C_{O_2,l}) \quad (A.17)$$

Deve-se agora considerar a taxa de combustão de carvão a partir do consumo de oxigênio na superfície do núcleo carbonáceo. Estudos experimentais de grande aceitação (AVEDESIAN e DAVIDSON, 1973; ROSS e DAVIDSON, 1981) indicam que a reação de combustão do carbono na queima de carvão em leitos fluidizados pode ser dada por um dos dois mecanismos:

Logo, para controle difusivo da reação, temos que a taxa de combustão da partícula seja expressa como:

$$R_{rea,c}(r,l) = \alpha J_{O_2} \quad (\text{A.20})$$

Sendo,

α Coeficiente estequiométrico para reações do oxigênio com o carbono fixo, *adimensional*.

Enquanto, os possíveis valores de α são:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \alpha = 1 & \text{Para modelo 1).} \\ \alpha = 2 & \text{Para modelo 2).} \end{array} \right. \quad (\text{A.21})$$

A taxa de reação de combustão controlada pela cinética química, assumindo que a reação seja de primeira ordem, é dada como:

$$R_{rea,c}(r,l) = \alpha (4\pi l^2) k_c C_{O_2,l} \quad (\text{A.22})$$

Sendo,

k_c Coeficiente de taxa de reação intrínseco do carvão, *m/s*.

Para a situação mais genérica de taxa de reação controlada simultaneamente por efeitos difusivos e cinéticos, as equações (A.13), (A.17), (A.20) e (A.22) devem ser válidas

simultaneamente. Assim, a taxa de combustão de partículas de carvão com altos teores de cinzas pode ser expressa como:

$$R_{rea,c}(r,l) = (4\pi l^2) K_c C_{O_2,p} \quad (A.23)$$

Sendo,

K_c Coeficiente global de taxa de reação de combustão de carvão, m/s .

Onde o coeficiente global de taxa de combustão de carvão é dado pela seguinte relação:

$$\frac{1}{K_c} = \frac{1}{k_c} + \frac{2l^2}{ShD_g r \alpha} + \frac{l(r-l)}{D_a r \alpha} \quad (A.24)$$

A.2 Taxa de reação na absorção de SO_2 por calcário na combustão de carvões

Para determinação da taxa de absorção de SO_2 pelas partículas de calcário, assume-se que estas sejam esféricas e de raio r , variável apenas por atrito, e que $P_l(r)$ seja sua a função densidade de probabilidade da distribuição granulométrica no leito.

Seja $R_{rea,l}(r)$ a taxa de reação de absorção de enxofre pelas partículas de calcário contidas na faixa de bitolas $r - \Delta r/2 \leq r \leq r + \Delta r/2$. Então, a taxa de absorção de SO_2 no leito pelas partículas de calcário nesta faixa é dada como:

$$\left[\frac{R_{rea,l}(r) n_l(r)}{V_E} \right] \quad (A.25)$$

Sendo,

$R_{rea,l}(r)$ Taxa de absorção de enxofre no leito pela partícula de calcário de raio r , $kmol/s$.

$n_l(r)$ Número de partículas de calcário no leito com raio r , *adimensional*.

O número de partículas de calcário no leito com bitolas no intervalo $r \pm \Delta r/2$ e dado por:

$$n_l(r) = \frac{M_l(r)}{m_l(r)} \quad (\text{A.26})$$

Sendo

$M_l(r)$ Massa total no leito de partículas de calcário com raio r , *kg*.

$m_l(r)$ Massa de uma partícula de calcário com raio r , *kg*.

A massa de partículas de calcário presente no intervalo $r \pm \Delta r/2$ é dada por:

$$M_l(r) = M_l P_l(r) \Delta r \quad (\text{A.27})$$

Sendo,

M_l Massa total de calcário no leito, *kg*.

A massa de uma partícula de calcário com raio r é expressa como:

$$m_l(r) = \frac{4}{3} \pi r^3 \rho_l \quad (\text{A.28})$$

Sendo,

ρ_l Densidade aparente do calcário, *kg/m³*.

Assim, o número de partículas de calcário presente no intervalo $r \pm \Delta r/2$ pode ser reescrito como:

$$n_l(r) = \frac{4M_l P_l(r) \Delta r}{3\pi r^3 \rho_l} \quad (\text{A.29})$$

E a equação (A.25) como:

$$\left\{ \frac{3M_l}{4\pi AH_{mf}} \frac{R_{rea,l}(r) P_l(r) \Delta r}{\rho_l r^3} \right\} \quad (A.30)$$

Levando esta expressão no limite quando Δr tende a zero, e integrando para toda faixa de bitolas de calcário presente no leito, obtém-se que a taxa de absorção de enxofre por calcário no leito, resulta:

$$R_{rea,l} = \frac{3M_l}{4\pi \rho_l AH_{mf}} \int_{r=0}^{r=r_{m,l}} \frac{P_l(r) R_{rea,l}(r)}{r^3} dr \quad (A.31)$$

Onde $r_{m,l}$ é o máximo raio de partícula de calcário no leito.

Figura A. 2 - Esquema da absorção de SO_2 pela partícula de calcário, e as condições de contorno das concentrações de SO_2 em torno da partícula.

Para resolução da equação (A.31), a taxa de absorção de enxofre por uma partícula de calcário deve ser determinada. Assim, considere-se uma partícula de calcário esférica e de raio r que sofra encolhimento apenas por atrito. As resistências a absorção de SO_2 pela partícula de calcário no meio fluidizado são devidos: a (i) difusão de SO_2 através do meio particulado e filme envolvente da partícula de calcário, e (ii) pela cinética das reações químicas heterogêneas na partícula de calcário, onde são inclusos a difusão em poros e a

difusão iônica na fase sólida. A Figura A.2 apresenta uma ilustração das concentrações do dióxido de enxofre em torno da partícula.

Considere-se que a concentração de SO_2 seja constante na fase de particulado e despreza-se efeitos convectivos. O problema de difusão mássica radial em torno da partícula é apresentado como:

$$\frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{dC_{SO_2}(\xi)}{d\xi} \right) = 0 \quad (A.32)$$

Sendo,

$C_{SO_2}(\xi)$ Concentração de dióxido de enxofre no raio ξ da partícula de calcário, $kmol/m^3$.

Para o transporte do SO_2 por difusão através do meio particulado e filme envolvente da partícula, caso (i), tem-se as seguintes condições de contorno:

$$\begin{cases} C_{SO_2}(r) = C_{SO_2,s} \\ C_{SO_2}(\infty) = C_{SO_2,p} \end{cases} \quad (A.33)$$

Sendo,

$C_{SO_2,s}$ Concentração de dióxido de enxofre na superfície externa da partícula de calcário, $kmol/m^3$.

$C_{SO_2,p}$ Concentração de dióxido de enxofre na emulsão, $kmol/m^3$.

Neste caso, a solução da equação (A.32) é dado por:

$$C_{SO_2}(\xi) = C_{SO_2,p} - (C_{SO_2,p} - C_{SO_2,s}) \frac{r}{\xi} \quad (A.34)$$

A descarga molar de SO_2 na superfície da partícula é dada pela lei de *Fick* como:

$$J_{SO_2} = (4\pi r^2) D_{E,SO_2} \left(\frac{dC_{SO_2}}{d\xi} \right)_{\xi=r} \quad (A.35)$$

Sendo,

J_{SO_2} Descarga molar difusiva de SO_2 na superfície externa de uma partícula de calcário, $kmol/s$.

Assumindo-se a difusividade do dióxido de enxofre seja igual à difusividade do oxigênio, tem-se então, em vista das equações (A.34) e (3.106), que:

$$J_{SO_2} = 2\pi r Sh D_g (C_{SO_2,p} - C_{SO_2,s})_{\xi=r} \quad (A.36)$$

Para determinação da taxa de absorção de SO_2 pelas partículas de calcário, mecanismos de reação devem ser propostos. Diversos estudos experimentais (DA SILVA, 2003; SAMANIEGO, 2003; MICHELS JR., 2004) consideram as seguintes reações globais para sulfatação das partículas de calcário:

Assim, para controle difusivo da reação, a taxa de reação de uma partícula de calcário resulta como:

$$R_{rea,l}(r) = J_{SO_2} \quad (A.38)$$

A taxa de reação de absorção de SO_2 controlada pela cinética química, assumindo que a reação seja de primeira ordem, é dada como:

$$R_{rea,l}(r) = (4\pi r^2) k_l C_{SO_2,s} \quad (A.39)$$

Sendo,

k_l Coeficiente de taxa de reação intrínseco da absorção do SO_2 pelo calcário, m/s .

Combinando-se as equações (A.36), (A.38) e (A.39) obtemos que a taxa de reação global de absorção do enxofre pela partícula de calcário controlada pelas resistências de difusão do SO_2 pelo meio particulado e filme envolvente, e cinética das reações químicas.

$$R_{rea,l}(r) = (4\pi r^2) K_l C_{SO_2,p} \quad (A.40)$$

Sendo,

K_l Coeficiente global da taxa de absorção do SO_2 pelas partículas de calcário, m/s .

Onde o coeficiente global de taxa de absorção de SO_2 pelas partículas de calcário é dado através da seguinte relação:

$$\frac{1}{K_l} = \frac{1}{k_l} + \frac{2r}{ShD_g} \quad (A.41)$$

APÊNDICE B - EXPERIMENTOS NO REATOR DE LEITO FLUIDIZADO DO NETEF

Em conjunto com o trabalho de modelagem foram realizados experimentos em um reator de leito fluidizado em escala piloto para levantamento de dados empíricos a serem comparados com os resultados de simulação. Entre os resultados considerados estão às distribuições granulométricas de particulado no leito e elutriado, suas cargas de material combustível, e as concentrações de gases em diversas posições axiais e radiais no leito, *freeboard* e na exaustão.

Este Apêndice descreve os principais componentes do reator, os materiais sólidos empregados e o procedimento experimental adotado. Especificações técnicas mais detalhadas do reator, de seus periféricos podem ser encontradas em Tureso (2004), Costa (2005) e Ávila (2008).

B.1 Descrição do reator de leito fluidizado

Um esquema da planta piloto e periféricos é apresentado na Figura B.1, incluindo: 1) corpo do reator, 2) sistema de alimentação de particulado, 3) sistema de tratamento de gases de exaustão, 4) sistema de alimentação de gases de fluidização, 5) sistema de sangria e nível do leito, 6) sistema de partida e aquecimento, 7) sondas de análises, 8) linha de amostragem de gases e analisadores, 9) sistema de aquisição de dados. Cada um destes itens é discutido nas próximas seções.

Figura B. 1 - Esquema do reator de leito fluidizado atmosférico borbulhante. 1) Corpo do reator; 2) Sistema de alimentação de particulado; 3) Sistema de tratamento dos gases de exaustão; 4) Sistema de alimentação dos gases de fluidização; 5) Sistema de sangria e nível do leito; 6) Sistema de partida e aquecimento; 7) sondas de análise; 8) Linha de amostragem de gases e analisadores ;e 9) Sistema de aquisição de dados.

B.1.1 Corpo do reator

O reator é formado por seis módulos de base retangular sobrepostos verticalmente, perfazendo uma altura de aproximadamente 3,0 m, e fixado em dois suportes na torre de sustentação, que possui 10,0 m de altura. A Figura B.2 mostra um esquema do corpo do reator e suas sub-estruturas.

Figura B. 2 - Esquema do corpo do reator, 1) Câmara plena ou plenum, 2) Câmara de combustão, e 3), 4), 5) e 6) Módulos do freeboard.

O primeiro módulo, ou câmara *plenum*, é confeccionada em chapa de aço carbono, e possui uma altura de 0,15 m e seção transversal de 0,5 m x 0,5 m. Neste módulo ocorre a entrada dos gases de fluidização e gás GLP utilizado na partida para pré-aquecimento do leito. Após entrar nesta câmara, os gases seguem para o módulo seguinte através de uma placa

distribuidora fixada entre ambos. A placa distribuidora de gases possui 39 injetores do tipo torre dispostos em configuração hexagonal, com 0,10 m de altura e um total de 198 orifícios.

O segundo módulo, chamado de câmara de combustão, é construído em aço inox 304, e possui altura de 0,6 m e seção transversal de 0,5 m x 0,5 m. Em uma de suas faces encontram-se duas fileiras com oitos orifícios cada distribuídos ao longo da altura, que possibilitam a introdução de sondas de medição de temperatura, pressão e gases de amostragem. Na parede oposta, três orifícios com diâmetro de 50,0 mm cada permitem o controle do nível do leito em 0,17m, 0,27m e 0,34 m. Na base da câmara de combustão, junto à placa distribuidora de gases, existe uma saída de 50,0 mm de diâmetro que possibilita a drenagem total do leito pelo fundo. A Figura B.3 apresenta uma vista do primeiro e segundo módulos do reator durante manutenção.

Figura B. 3 - Vista do primeiro e segundo módulos do reator durante manutenção.

Os demais módulos, chamados de módulos do *freeboard*, são manufaturados em aço inox 304 com altura de 0,6 m cada e seção transversal de 0,75 m x 0,75 m. Afim de garantir homogeneidade de temperatura na seção transversal, eles são revestidos por placas de silicato de cálcio, com aproximadamente 45 mm de espessura e função de isolante térmico. Placas de

aço inoxidável de 1,00 mm de espessura protegem as placas de silicato de choques mecânicos e contato ambiente. Em cada módulo do *freeboard*, na face perpendicular a face de amostragem da câmara de combustão, estão dispostos dois orifícios de medição e amostragem. No primeiro módulo do *freeboard* encontram-se as entradas de material particulado para o reator. A Figura B.4 apresenta uma vista externa do reator na altura dos módulos do *freeboard*.

Figura B. 4 - Vista externa do reator na região do *freeboard* com sondas de amostragem posicionadas. Em círculos vermelhos, os orifícios de amostragem.

Para suavizar o fluxo dos gases entre a câmara de combustão e o primeiro módulo do *freeboard*, e evitar o acúmulo de material particulado nos cantos vivos formados, um

dispositivo de acoplamento é fixado entre os módulos como mostrado na Figura B.5. Este dispositivo possui um ângulo de 45° e largura de aresta de base de 12,5 mm.

Figura B. 5 - Vista superior da câmara de combustão no interior do reator. Ao fundo, dispositivo de acoplamento entre a câmara de combustão e o módulo do *freeboard*, entrada de alimentação de carvão, bocal do maçarico e sondas de amostragem posicionadas na câmara de combustão.

B.1.2 Sistema de alimentação de particulado

O sistema de alimentação de material particulado é composto por duas linhas independentes, sendo uma para combustível (carvão) e a outra para o absorvente (calcário). Cada linha possui um silo de armazenagem de 0,5 m³ fixado no ultimo patamar da torre de sustentação, e o fluxo de alimentação por gravidade é controlada por um conjunto de válvula rotativa acoplada a um redutor e motor. O controle da rotação é feito por um variador de frequência localizado no andar térreo junto ao painel de controle. Na Figura B.6 é apresentado o painel de controle geral do reator. Nas Figuras B.7 e B.8 são mostradas, respectivamente, as curvas de calibração dos variadores de frequência para o calcário e para o carvão (COSTA, 2005).

Figura B. 6 - Painel de controle geral do reator. A) Chave de força do painel. B) Variadores de frequência de alimentação. C) Chave de força do compressor SOMA. D) Controlador de partida a gás GLP.

Figura B. 7 - Curva de calibração do variador de frequência da alimentação do calcário IPEÚNA-SP de mesma distribuição granulométrica apresenta na Tabela B.2.

Figura B. 8 - Curva de calibração do variador de frequência da alimentação do carvão CE-4500 de mesma distribuição granulométrica apresenta na Tabela B.3.

Uma das principais dificuldades técnicas encontradas durante os ensaios foi o entupimento na entrada de alimentação de carvão para o reator devido à aglomeração deste material. Na tentativa de reduzir ou limitar este efeito, dois dispositivos foram elaborados. O primeiro consistia de uma camisa d'água na seção final do duto de alimentação, que permitia reduzir drasticamente a temperatura interna do duto, e por consequência, a liberação do material betuminoso de característica aderente desprendido do carvão CE-4500 na faixa de temperatura entre 300 a 500°C (COSTA, 2005). O segundo aparato era composto por uma vareta de aço inoxidável de mesmo comprimento da seção inclinada do duto de alimentação e posicionada internamente ao mesmo, com uma de suas extremidades em formato helicoidal e tangente à superfície interna do duto, que permitiu a limpeza mecânica durante os ensaios. A vareta era acionada a cada dez minutos de operação ou quando o efeito de aglomeração era perceptível devido à queda brusca de temperatura do leito.

Na Figura B.9 são apresentados dois estágios de aglomeração na entrada do duto de alimentação de carvão antes da aplicação dos dispositivos. Na Figura B.10 mostra-se um croqui de concepção da camisa d'água. Na Figura B.11 é apresentada uma visão da vareta de varrimento com vistas destacadas de seu sistema de acoplamento com o duto de alimentação e sua ponta de limpeza helicoidal. Na Figura B.12 é dada uma visão externa do reator com os dois sistemas instalados.

B)

Figura B. 9 - Aglomeração do carvão na entrada do sistema de alimentação do carvão antes das modificações. A) Estágio inicial da aglomeração. B) Aglomeração em estágio crítico com obstrução total da entrada de carvão para o reator.

Figura B. 10 - Esquema da camisa d'água utilizada no sistema de alimentação de carvão.

Figura B. 11 - Vista da vareta de varrimento com imagens destacadas da ponta e do sistema de acoplamento com o duto de alimentação.

Figura B. 12 - Vista externa da entrada de alimentação de carvão. A) Camisa d'água. B) Vareta de aço de varrimento do duto de alimentação.

B.1.3 Sistema de tratamento dos gases de exaustão

O sistema de tratamento de gases de exaustão é composto por um separador de particulado do tipo termo ciclone seguido por um filtro de manga instalados nas dependências externas do laboratório (Figuras B.13 e B.14), ambos com a finalidade apenas de remover o particulado.

As partículas capturadas pelo termo ciclone, que correspondem a mais de 95% de todo material elutriado, são encaminhadas para um reservatório localizado no andar inferior da torre do termo-ciclone através de 4 mangueiras acopladas a um reservatório (Figura B.13). Os gases, após passarem pelo termo ciclone, são enviados para o bocal de sucção do filtro de mangas, que aspira ao mesmo tempo, os gases de combustão e atmosféricos promovendo resfriamento por diluição. No interior do filtro, as partículas excedentes são retidas pelas mangas e os gases da mistura são expurgados para a atmosfera.

Nos ensaios, após o reator apresentar uniformidade de temperatura e de concentrações de gases ao longo do tempo, uma das mangueiras de saída do termo ciclone era desacoplada e encapsulada por uma bolsa plástica, e era mantida até o final daquele ensaio, que durava de 3 a 4 horas. Este material foi guardado para posterior análise de sua distribuição granulométrica e carga de combustível.

Figura B. 13 - Vista do reservatório de armazenagem do material capturado pelo termo ciclone.

A)

B)

Figura B. 14 - Sistema de tratamento dos gases de exaustão. A) Termo ciclone. B) Filtro de manga, e ao fundo, torre de suporte do termo ciclone.

B.1.4 Sistema de alimentação e medição dos gases de fluidização

O ar necessário para a fluidização é fornecido por um compressor de lóbulos SOMA que dispõe de uma vazão máxima de $20 \text{ m}^3/\text{min}$ ou pressão de até 4000 mmca , com vazão controlada a partir de uma válvula de gaveta. Esta permitiu uma maior precisão no controle da vazão em relação à válvula borboleta utilizada em trabalhos anteriores (TURESO, 2004; COSTA, 2005).

Para cálculos da vazão mássica do ar de fluidização é utilizada uma placa de orifício de cantos vivos, construída segundo padrão ASME, com diâmetro de orifício de $47,75 \text{ mm}$ e espessura de $2,5 \text{ mm}$, instalada em dutos de PVC de $97,0 \text{ mm}$ de diâmetro interno.

A pressão a montante e a perda de carga entre a placa é medida por manômetro de coluna d'água, a pressão local por um barômetro Princo, e as temperaturas ambiente, no duto de gases e no leito por termopares do tipo K. As pressões são inseridas manualmente no sistema de aquisição de dados a cada 10 minutos ou quando necessário, enquanto as temperaturas são continuamente captadas pelo programa, que faz todos os cálculos necessários e fornece em tela a vazão mássica de gases de fluidização e a velocidade superficial de fluidização

B.1.5 Sistema de sangria do particulado do reator

O sistema de controle do nível do leito é feito pela escolha de abertura de um dos três bocais localizados na câmara de combustão (Figura B.15). A abertura de cada bocal é realizada por sua respectiva válvula de borboleta, enquanto as demais permaneciam fechadas. Todas as saídas dos bocais são conectadas diretamente ao duto de descarga, que por sua vez, é acoplada a um silo móvel através de um mangote flexível (Figura B.16).

O silo móvel possui uma capacidade de armazenamento de $0,5 \text{ m}^3$, e pode ser substituído rapidamente por outro silo através do fechamento da válvula de controle utilizada,

permitindo assim a continuidade de ensaios prolongados e a reposição no início de cada ensaio.

Figura B. 15 - Vista dos bocais da sangria e suas respectivas válvulas de controle. Na foto, reator operando com o uso do segundo bocal de controle do nível do leito.

Os materiais capturados pelos silos eram pesados, junto com o silo, em uma balança romana instalada na própria torre de sustentação, sendo utilizada uma polia manual para elevação deste material. Após a pesagem, o material particulado era vazado através de uma de uma válvula borboleta no fundo do silo, e armazenado em tambores. Em cada ensaio, uma amostra de aproximadamente 2kg era retirada do material sangrado e guardado para análise. Adota-se que esta amostra tenha a mesma distribuição granulométrica e composição química do material presente no leito.

Figura B. 16 - Vista do silo móvel. A) Silo acoplado ao sistema de sangria. B) Silo desacoplado para pesagem e retirada de material sangrado.

B.1.6 Sistema de partida e aquecimento do reator

A partida e o aquecimento do reator são realizados através da queima de gás liquefeito de petróleo injetado junto com o ar de fluidização na câmara plena. No terceiro módulo do reator, um queimador fixado em um ângulo de 30° com a parede permite a deflagração inicial da queima na superfície do leito. Por medidas de segurança, todo o sistema de aquecimento com uso de gás GLP é monitorado pelo painel de controle, com o uso de um sensor de infravermelho fixado paralelamente ao queimador.

Em caso de falha na combustão do GLP durante a partida ou no aquecimento, o sensor óptico capta a ausência de chama no topo do leito, e emite um sinal para painel de controle que corta automaticamente todo o fluxo de GLP para o reator, e um alarme sonoro é acionado. Uma nova partida é permitida somente 30 segundos, após que o alarme é desativado. Este cuidado garante que o sistema purge o GLP remanescente no equipamento antes de proceder a

uma nova tentativa, evitando uma possível explosão e, por consequência, danos ao equipamento.

Figura B. 17 - Vistas externa A) e interna B) do queimador e sensor óptico no reator.

Figura B. 18 - Perfil da temperatura de aquecimento do leito durante partida com uso de GLP e carvão mineral.

Na Figura B.17 apresenta-se vistas externa e interna do queimador e sensor. Na Figura B.6 tem-se uma vista do painel de controle dos sistemas de partida e de segurança.

Depois de assegurado o processo de queima do GLP, a temperatura do leito denso atingia patamares entre 500 a 600°C após uma hora de aquecimento. Neste instante era possível iniciar a alimentação do carvão mineral em doses graduais até a substituição completa do GLP. Na Figura B.18 é apresentado um perfil ilustrativo da temperatura do leito ao longo do tempo de aquecimento. Os declives apresentados na figura foram ocasionados pelo desligamento da entrada de GLP para o reator devido ao sensor de segurança. Para novas partidas foi necessário regular o fluxo de ar de fluidização para diminuição na turbulência do leito, que ocasionava a extinção da chama. Este efeito era marcante até temperaturas de 650°C.

B.1.7 Sondas de amostragem de gases e temperatura

Nos ensaios foram empregadas dezoito sondas divididas em sondas de medição de temperatura, de amostragens de gases, e de amostragens de gases e medição de temperatura. A sonda para captura dos gases de exaustão é a mesma utilizada em Costa (2005). As demais foram confeccionadas no próprio laboratório, sendo manufaturadas em tubos de aço inox de 10 mm de diâmetro externo e 5,3 mm de diâmetro interno, com um comprimento de haste de 1060 mm. Na Figura B.19 são apresentados os três tipos de sondas confeccionadas durante a realização destes ensaios.

As sondas de amostragem de gases utilizadas na câmara de combustão, do tipo A, devido às altas concentrações de particulado, são montadas com um adaptador de filtragem na sua extremidade interna ao reator, e com um silo de armazenagem de particulado na extremidade oposta. O dispositivo de filtragem consiste de uma haste oca, confeccionada com o mesmo material da sonda, com uma de suas pontas lacradas e a outra adaptável para ser rosqueada na sonda. A haste de filtragem possui 4 rasgos de 30,0 mm de comprimento com 2,0 mm de espessura, e no seu interior, uma malha de mesh 140 é enrolada permitindo uma filtragem primária do particulado. Na extremidade oposta da sonda, um silo para captura de finos, que porventura passassem o filtro primário, foi confeccionado em um corpo de alumínio com sua entrada e saída de gases dispostos em diferentes alturas, e transversais entre si.

As sondas de amostragem de gases e temperatura do tipo B são montadas apenas com a haste de filtragem primária, e no seu interior, está inserido um termopar do tipo K encapsulado por tubo de alumina de 3,0 mm de diâmetro externo. Sendo possíveis medidas de temperatura e concentrações de gases.

As sondas de análise de temperatura, do tipo C, são posicionadas apenas na região do leito denso. Elas possuem termopares do tipo K envolvidos por alumina e sua extremidade em contato com o reator é lacrada.

A Figura B.20 mostra os dispositivos de filtragem primária das sondas do tipo A e B, e o silo de saída das sondas do tipo A.

A escolha de uma maior área de sucção na haste de filtragem primária ocorreu devido aos constantes entupimentos ocorridos com o uso de apenas uma malha inserida somente na seção transversal, como ilustrado na Figura B.21.

Figura B. 19 - Sondas de amostragem confeccionadas no NETeF. A) Sonda de análise de gases na câmara de combustão. B) Sonda de análise de gases e temperaturas nos módulos do *freeboard*. C) Sonda de análise de temperatura no leito.

Figura B. 20 - Dispositivos para retenção e captura de sólidos nas sondas de amostragem de gases. A) Esquema da haste inserida no interior do reator. B) Silo de captura posicionada na saída dos gases das sondas para analisadores.

Figura B. 21 - Entupimento de sondas de amostragem de gases com uso apenas da área da seção transversal da haste .

Figura B. 22 - Posições das sondas de amostragens de gases na câmara de combustão, nos módulos do freeboard e na exaustão.

Na Figura B.22 são apresentadas as posições das sondas de amostragem de gases no reator, sendo adotado como origem do sistema cartesiano o ponto central ao nível do topo dos injetores. As sondas do tipo C são posicionadas nas posições $(-50, 0, 70) \text{ mm}$, $(-50, 0, 170) \text{ mm}$ e $(50, 0, 270) \text{ mm}$. Para averiguação da temperatura do processo escolheu-se a sonda na altura de 170 mm , e somente ela é referenciada neste trabalho.

B.1.8 Linha de análise dos gases.

A análise de gases é realizada sonda por sonda, sendo que enquanto uma sonda é ativada, as demais permanecem fechadas, e assim sucessivamente. Os gases de amostragem são encaminhados para um filtro de aço inox com fibra de vidro não higroscópico seguido por um trocador de calor (caixa condensadora), para retenção de particulado e umidade danosos aos analisadores (Figura B.23).

Após sofrer este tratamento, os gases são encaminhados para uma das duas linhas de analisadores através de uma válvula de fluxo cruzado, enquanto a linha de análise não utilizada recebe ar atmosférico para a limpeza interna. No momento em que a análise de gases termina na linha escolhida, a válvula é invertida, e o processo de leitura inicia na outra linha, enquanto que na outra, a limpeza acontece.

Uma das linhas de amostragem é composta por analisador de gases da marca Tecnomotor modelo TM-131 que permite a leitura visual das concentrações de gases CO_2 (0-20 %vol.), CO (0-15 %vol.), O_2 (0-25 %vol.) e NO_x (0-5000 ppm). A outra linha é composta por analisadores da marca Horiba conectados em série, que permitem tanto leitura visual quanto captada em sistema de aquisição das concentrações de gases SO_2 (0-1000 ppm e 0-4000 ppm), CO_2 (0-20 %vol) pelo modelo VI-510, e O_2 (0-25 %vol) pelo modelo MPA-510. Na Figura B.24 é apresentada uma vista dos analisadores de gases utilizados.

Figura B. 23 - Vista do sistema de tratamento de gases da linha de análise dos gases. Filtro de aço inoxidável com fibra de vidro não higroscópico e caixa condensadora.

Figura B. 24 - Analisadores de gases.

A escolha de duas linhas em paralelo e não simultâneas ocorreu devido a três motivos. O primeiro é a incompatibilidade de trabalhar com todos em série devido ao fluxo de bombeamento ser dissimilar entre as marcas. O segundo motivo é que o uso de duas linhas trabalhando em série impõe um maior fluxo de gases pela sonda, favorecendo o seu entupimento. O terceiro é que as concentrações de gases nos analisadores Horiba são mascarados pelo analisador Tecnomotor como percebido em testes iniciais.

Na Figura B.25 é apresentado um esquema da linha de análise dos gases, sendo todos estes dispositivos acoplados através de mangueiras de teflon com 2/5" de diâmetro externo e 1/4" de diâmetro interno.

Figura B. 25 - Esquema da linha de análise dos gases. Utilizada mangueira de teflon com 10,0 mm de diâmetro externo para ligação entre as partes do sistema.

Após a análise de uma sonda, adotou-se por medidas de precaução, uma limpeza da linha da sonda anterior ao sistema de tratamento dos gases através de um fluxo de ar comprimido para limpeza de seu filtro primário. Outra medida adotada foi à troca constante da fibra de vidro não higroscópica, que ocorria a cada 30 minutos ou no início de cada ensaio, permitindo que as medidas de gases não fossem mascaradas pela umidade retida.

B.1.9 Sistema de aquisição de dados

O sistema de aquisição de dados é composto por um computador com processador Intel Pentium III de 912 Mhz e 512 Mb de memória RAM equipado com placa de aquisição *National Instruments* PCI-6023 e módulo SCXI-1303. O programa de aquisição é desenvolvido em plataforma LAbView versão 6.1 também da *National Instruments Corp.* As medidas de temperatura e as concentrações de gases dos analisadores Horiba são enviadas diretamente ao programa em valores médios com frequência de 1 Hz. Cálculos da vazão mássica e velocidade superficial dos gases de fluidização no leito são realizados automaticamente pelo programa, e os dados são expostos em tela e armazenados.

Em paralelo, um sistema de aquisição manual é adotado em planilha Excel, sendo anotados os valores de controle da temperatura do leito, velocidade de fluidização, massa no silo de drenagem, e as concentrações de gases nos analisadores Horiba e Tecnomotor.

B.2 Material particulado

B.2.1 Areia

Nas partidas do reator foi utilizada areia de sílica denominada de Areia de Quartzo Industrial AG(30-40) proveniente da empresa de MINERAÇÃO JUNDU Ltda localizada em Descalvado-SP, e com densidade média de $2650 \text{ kg} / \text{m}^3$ (ÁVILA, 2008). Para determinação do perfil granulométrico deste particulado, e de seus diâmetros médios mássico e superficial, foi utilizado um agitador mecânico com peneiras da série Tyler da marca SOLOTEST com um tempo de ensaio de 30 minutos. Na Tabela B.1 são apresentados os valores mássicos retidos entre as faixas de peneiras e os valores dos diâmetros médios. Na Figura B.26 é dado o perfil granulométrico da areia.

Define-se o diâmetro médio como:

$$d_{m,mássico} = \sum D_i \cdot X_i \quad (\text{B.1})$$

Sendo,

D_i Diâmetro médio entre duas peneiras consecutivas, *mm*.

X_i Fração mássica de material retido entre duas peneiras consecutivas, *adimensional*.

O diâmetro médio superficial, ou também chamado de diâmetro médio de *Sauter*, utilizado como o diâmetro de referência nos cálculos hidrodinâmicos e reativo, é definido como:

$$d_{m,sup.} = \frac{1}{\sum \frac{X_i}{D_i}} \quad (\text{B.2})$$

Tabela B. 1 - Distribuição granulométrica da areia de Quartzo.

Peneiras	Faixas granulométricas (mm)	Massa (g)	D_i (mm)	X_i	X_i/D_i (mm ⁻¹)
1	2,000-1,680	2,62	1,8400	0,002	0,001
2	1,680-1,410	3,23	1,5450	0,003	0,002
3	1,410-1,000	18,93	1,2050	0,016	0,014
4	1,000-0,710	146,89	0,8550	0,1266	0,148
5	0,710-0,420	676,08	0,5650	0,582	1,030
6	0,420-0,125	299,98	0,2725	0,258	0,948
7	0,125-0,000	13,55	0,0625	0,012	0,187
Massa total=		1161,28		$\sum X_i/D_i =$	2,33
			$d_{m,mássico} =$	0,536	mm
			$d_{m,sup.} =$	0,429	mm

Figura B. 26 - Perfil da distribuição granulométrica da areia de quartzo.

B.2.2 Calcário

O calcário utilizado neste trabalho é proveniente da empresa CALCÁRIO BONANÇA Ltda localizada na região de Piracicaba no município de Ipêuna-SP. Uma composição química elementar parcial deste calcário dolomítico é apresentada na Tabela 6.3 (CRNKOVIC, 2003).

As partículas de calcário, obtidas já britadas da mineradora, foram secas ao sol para retirada do excesso de umidade, e posteriormente peneiradas em um agitador mecânico para

retirada de grossos maiores que 2,00 mm e finos menores que 0,180 mm. Posteriormente, é utilizado do mesmo procedimento utilizado para a areia na caracterização de sua granulometria. Na Tabela B.2 apresenta-se os diâmetros médios do calcário.

Tabela B. 2 - Distribuição granulométrica do calcário dolomítico Ipeúna utilizado neste trabalho.

Peneiras	Faixas granulométricas (mm)	Massa (g)	D_i (mm)	X_i	X_i/D_i (mm ⁻¹)
1	2,000-1,680	36,27	1,8400	0,030	0,016
2	1,680-1,410	124,37	1,5450	0,103	0,067
3	1,410-1,000	346,41	1,2050	0,287	0,238
4	1,000-0,710	300,32	0,8550	0,249	0,291
5	0,710-0,420	232,76	0,5650	0,193	0,342
6	0,420-0,125	132,78	0,2725	0,110	0,404
7	0,125-0,000	32,6	0,0625	0,027	0,403
Massa total=		1205,51	$\sum X_i/D_i =$		1,79
$d_{m,mássico} =$			0,915	mm	
$d_{m,sup.} =$			0,558	mm	

B.2.3 Carvão

Utilizou-se nos ensaios o carvão mineral procedente de Criciúma-SC obtido a partir do processo de beneficiamento do carvão bruto da camada Barro Branco da mina Esperança e comercializado pela CARBONÍFERA METROPOLITANA S/A. com a denominação de carvão CE-4500. A composição química elementar parcial e análise imediata deste carvão são apresentadas, respectivamente, nas Tabelas 6.1 e 6.2.

O processo de secagem e peneiramento utilizado para calcário também é realizado para o carvão. Na Tabela B.3 são apresentados os diâmetros médios para o carvão, e na Figura 6.1 o seu perfil granulométrico.

Tabela B. 3 - Distribuição granulométrica do CE-4500 utilizado neste trabalho.

Peneiras	Faixas granulométricas (mm)	Massa (g)	D_i (mm)	X_i	X_i/D_i (mm ⁻¹)
1	2,000-1,680	3,98	1,8400	0,003	0,002
2	1,680-1,410	15,92	1,5450	0,013	0,009
3	1,410-1,000	166,90	1,2050	0,139	0,115
4	1,000-0,710	370,91	0,8550	0,308	0,360
5	0,710-0,420	375,61	0,5650	0,312	0,552
6	0,420-0,125	261,22	0,2725	0,217	0,796
7	0,125-0,000	9,55	0,0625	0,008	0,127
Massa total=		1204,09	$\sum X_i/D_i =$		1,96
Diâmetro médio mássico=		0,693	mm		
Diâmetro médio superficial=		0,510	mm		

B.3 Condições operacionais ensaiadas e nomenclatura utilizada dos ensaios

No total foram ensaiadas 4 condições operacionais, onde se variou a velocidade de fluidização, e a taxa de alimentação de carvão e calcário como mostrado na Tabela B.4 O teste 1 e 2 utilizou a mesma velocidade de fluidização, e o mesmo ocorreu entre os testes três e quatro. Teste-nos 1 e 3 utilizou-se somente carvão. Nos testes 3 e 4 utilizou-se carvão e calcário simultaneamente mantendo-se a mesma razão mássica de alimentação de carvão e calcário em ambos os casos. Em todos os ensaios foi empregada uma altura de leito expandido de 0,27 m. A temperatura média indicada é a média das temperaturas da sonda posicionada na altura de 0,17 m.

Tabela B. 4 - Condições operacionais médias utilizadas nos testes.

Teste	Nomenclatura Utilizada	U (m/s)	$F_{0,c+a}$ (g/s)	$F_{0,l}$ (g/s)	T_l^* (°C)
1	0.33C4.88L0T1108	0,33	4,88	0,00	835
2	0.33C4.88L1.81T1113	0,33	4,88	1,81	840
3	0.47C5.45L0T1123	0,47	5,45	0,00	850
4	0.47C5.45L2.02T1123	0,47	5,45	2,02	850

* Temperatura média do leito. Utilizado termopar posicionado na altura de 0,17 m.

A nomenclatura utilizada durante os testes são:

XXCYYLZZTWW

XX Velocidade de fluidização utilizada, *m/s*

YY Taxa de alimentação de carvão, *g/s*.

ZZ Taxa de alimentação de calcário, *g/s*.

WW Temperatura do leito, *K*.

B.4 Procedimento experimental

O procedimento experimental para partida do reator obedeceu à seguinte sequência:

- 1) Ligar analisadores de gases e aguardar uma hora ou mais antes de iniciar o processo de calibração. O procedimento para calibração dos analisadores Horiba é detalhado em Ávila (2008);
- 2) Verificar conexões das sondas de amostragem de gases e temperatura, as quais devem estar bem fixadas e sem indício de vazamento;
- 3) Inspeccionar o interior do reator e realizar a limpeza na janela de inspeção para a retirada de fuligem;
- 4) Fechar todas as válvulas de descarga de material particulado, e carregar o reator com aproximadamente 120 *kg* de areia;
- 5) Ligar bombas d'água utilizadas no arrefecimento do termo ciclone e na camisa d'água da alimentação de carvão;
- 6) Ligar o compressor WORTHINGTON utilizado no resfriamento do sensor óptico de presença de chama do leito e do ar do maçarico de partida;
- 7) Verificar se as válvulas da linha de ar para o maçarico e sensor óptico estão abertas. A pressão de ar na válvula de ar para o maçarico deve estar com uma pressão de 2,5 *bar*;

- 8) Abrir as válvulas dos cilindros de GLP e ajustá-las a uma pressão de 3 *bar*. Abrir a válvula d'água utilizada no descongelamento dos cilindros de GLP;
- 9) Verificar se as válvulas de água para a torre de resfriamento do termo ciclone e da camisa d'água estão abertas, caso contrário, abrí-las;
- 10) Ligar o sistema de aquisição de dados para monitoramento da temperatura e da vazão de ar para o leito;
- 11) Ligar o compressor SOMA pelo painel de controle. Regular a vazão dos gases de fluidização entre 1,5 a 2 vezes a velocidade de mínima fluidização do material presente no leito a temperatura ambiente;
- 12) Carregar a caixa condensadora dos gases de amostragem com 4 *kg* de gelo e trocar, ou colocar, um novo filtro na sua linha de filtragem, a qual deve ser substituída a cada 30 minutos de operação;
- 13) Ligar o painel de controle da chama do maçarico e abrir a válvula de gás GLP para o maçarico. A pressão na válvula deve estar em 5 *psi*. Regular a vazão do gás GLP para o maçarico até que sua chama esteja próxima a superfície do leito;
- 14) Aguardar o painel de controle permitir a entrada de gás GLP em conjunto com os gases de fluidização. Após a liberação, abrir a válvula de GLP para os bicos injetores na placa injetora, a qual deve estar a uma pressão entre 1 a 2 *bar*, e acionar o botão de combustão no painel de controle. Caso o processo de queima de gás GLP não ocorra normalmente, o painel de controle travará a entrada de GLP para o maçarico automaticamente;
- 15) Estabilizado o processo de queima de GLP no leito, regular o fluxo dos gases de fluidização e de GLP a cada incremento da temperatura do leito de 50°C. A velocidade de fluidização no leito não deve ultrapassar a 3,5 vezes a de mínima fluidização, enquanto a chama da combustão deve apresentar uma coloração levemente azulada;
- 16) Caso a chama da combustão apague, o painel de controle cortará toda a alimentação de GLP para o reator e um sinal sonoro será acionado. Neste caso, o alarme deve ser desligado, e após 30 segundos uma nova partida será permitida. Reiniciar procedimentos a partir do item 14;
- 17) Quando temperatura do leito atingir 650°C, iniciar a alimentação de carvão com aproximadamente 20% da vazão mássica estimada para o regime

permanente durante um período de 10 minutos. Após este tempo, desligar o fluxo dos gases de GLP e regular a vazão mássica de carvão para que ocorra aquecimento do reator;

- 18) Em torno da temperatura de 820°C, regular a vazão de fluidização para a velocidade desejada de ensaio, e depois ajustar aos poucos a alimentação de carvão até que o reator atinja a temperatura de teste;
- 19) Após a temperatura do leito e a concentração dos gases estiverem estáveis, abrir válvula do dreno para regulagem da altura do leito. Esperar 40 minutos para verificar se a temperatura e concentrações ainda permanecem estáveis. Em caso afirmativo, iniciar o ensaio.

Depois de realizada a partida de aquecimento do reator, o procedimento experimental utilizado em cada ensaio seguiu a seguinte ordem:

- 20) Fechar válvula do dreno, trocar o silo de armazenagem do dreno por um novo, e abrir novamente a válvula. Inserir o recipiente para coleta de material elutriado em um dos dutos de descarga do termo ciclone. Iniciar a contagem do tempo de permanência do silo, do material sangrado e do coletor do elutriado;
- 21) Ajustar o programa de aquisição de dados para coletar os dados referentes à sonda a ser analisada e iniciar a aquisição;
- 22) Realizar a conexão da saída da sonda de interesse com a entrada da linha de entrada dos analisadores. Iniciar a aquisição de dados das concentrações de gases fornecida pelos Horiba. Esperar as concentrações de gases estabilizarem e aguardar 120 segundos de aquisição. Ao mesmo tempo, anotar manualmente valores fornecidos pelos Horiba em uma planilha;
- 23) Salvar os dados de aquisição e fechar a aquisição de dados da sonda analisada;
- 24) Direcionar o fluxo dos gases de amostragem para o analisador Tecnomotor, enquanto os Horiba aspiram ar atmosférico para limpeza de sua linha. Anotar manualmente os valores das concentrações de gases registradas pelo

- analisador. Terminada as anotações, desacoplar a conexão entre a sonda e a linha de análise de gases;
- 25) Fazer limpeza da linha da sonda utilizada com gás comprimido e depois fechá-la;
 - 26) Esperar um minuto e repetir os passos de 21 a 25 para todas as sondas de gases a serem analisadas. Caso todas as sondas já tenham sido avaliadas na amostragem, cortar a alimentação de calcário, caso aberta, e ir para procedimento 27;
 - 27) Fechar a válvula de sangria e o retirar recipiente de coleta de material elutriado. Anotar tempo de duração do ensaio. Pesar o material sangrado e separar 2 kg deste material para análise granulométrica e de material combustível;
 - 28) Ajustar a alimentação de calcário para nova relação de $F_{0,c+a}/F_{0,l}$, aguardar o sistema estabilizar, temperatura e concentrações de gases, e iniciar um novo ensaio a partir do procedimento 20). Caso todas as relações de $(Ca + Mg)/S$ tenham sido analisadas para esta velocidade de fluidização, ir para o item 29);
 - 29) Desligar a alimentação de carvão e esperar a temperatura do leito diminuir para 300°C;
 - 30) Deixar os analisadores de gases purgando ar ambiente durante uma hora antes de desligá-los;
 - 31) Desligar o painel de controle e demais periféricos do reator;
 - 32) Aguardar resfriamento do reator para temperatura ambiente, que demora aproximadamente 24 horas. Drenar todo material do leito pelo dreno da base e pesá-lo;
 - 33) Realizar a manutenção preventiva no reator.

B.5 Resultados experimentais

A seguir são apresentados os resultados experimentais obtidos, que consistem nas concentrações de gases SO_2 , CO , CO_2 , O_2 , NO_x e THC em diversas posições do reator, as distribuições granulométricas do particulado no leito e elutriado, e a carga de material comburente nestas amostras.

Tabela B.5 apresenta os principais parâmetros operacionais destes 4 testes.

Tabela B. 5 – Principais parâmetros operacionais dos testes empíricos.

Variável	Dimensão	Teste			
		0.33C4.88L0T1108	0.33C4.88L1.81T1113	0.47C5.45L0T1123	0.47C5.45L2.02T1123
H_l	m	0,270	0,270	0,270	0,270
A	m^2	0,250	0,250	0,250	0,250
T_l	$^{\circ}C$	835	840	850	850
$\bar{d}_p(\text{areia})$	μm	429	429	429	429
$\bar{d}_p(\text{carvão})$	μm	510	510	510	510
$\bar{d}_p(\text{calc.})$	μm	558	558	558	558
U	m/s	0,33	0,33	0,47	0,47
U/U_{mf}	Adimen.	4,34*	4,34*	6,18*	6,18*
$F_{0,c+a}$	g/s	4,88	4,88	5,45	5,45
$F_{0,l}$	g/s	0	1,81	0	2,02
M	kg	-	75,0	-	41,0
$(Ca+Mg)/S$	$Kmol/kmol$	0	6,46	0	6,46

*Velocidade de mínima fluidização calculada a partir da areia de partida.

B.6 Concentrações dos gases

As concentrações de gases de cada ensaio são apresentadas nas Tabelas B.6 a B.13

Na primeira tabela de cada ensaio apresenta-se valores médios e desvios capturados pelo sistema de aquisição de dados, sendo o tempo de análise utilizado entre 60 a 200s. Na segunda tabela de cada ensaio são mostrados os valores obtidos visualmente.

Dois analisadores de SO_2 foram utilizados. As tabelas de dados contêm ambas as leituras de ambos, sendo a primeira do analisador na faixa de leitura de 0-1000 *ppm*, e a segunda na faixa de leitura de 0-4000 *ppm*. O segundo analisador em faixa estendida foi utilizado quando as leituras do primeiro analisador extrapolavam seu fundo de escala.

Nas segundas tabelas de concentrações de cada ensaio, adotou-se o valor dado das concentrações de SO_2 para o analisador Horiba de 0-1000 *ppm*, caso o visor desse a mensagem de *over*, era utilizado a concentração dada pelo analisador de 0-4000 *ppm*.

Tabela B. 6 - Médias e desvios das concentrações de gases captados pelo sistema de aquisição de dados do teste 0.33C4.88L0T1108.

Sonda	Posição(mm)			Horiba (Sistema de aquisição)							
				CO_2	<i>des.</i>	O_2	<i>des</i>	SO_2	<i>des</i>	SO_2^*	<i>des</i>
	x	y	z	(%Vol.)	(%Vol.)	(%Vol.)	(%Vol.)	(ppm)	(ppm)	(ppm)	(ppm)
S1	0	125	20	15,56	0,09	-	-	704,43	6,77	681,30	8,36
S2	0	0	70	14,28	0,10	2,48	0,14	955,34	2,29	1173,97	25,28
S3	0	-125	120	14,55	0,10	2,67	0,12	955,44	2,44	1554,53	22,47
S4	0	125	170	15,11	0,12	2,66	0,23	943,51	19,18	1038,79	102,46
S5	0	0	220	14,56	0,10	3,83	0,11	623,30	50,51	597,45	99,29
S6	0	-125	270	14,32	0,17	4,00	0,42	394,52	21,04	300,98	19,95
S7-1	0	-125	320	14,43	0,09	3,71	0,11	475,58	20,43	372,69	21,80
S7-2	0	0	320	14,19	0,14	4,19	0,12	564,19	16,81	469,42	10,11
S7-3	0	125	320	14,23	0,09	4,66	0,11	338,62	24,12	213,99	23,16
S8-1	0	-125	370	14,86	0,11	2,33	0,09	494,16	35,60	371,18	38,53
S8-2	0	0	370	14,18	0,10	4,33	0,17	637,46	20,11	516,32	93,05
S8-3	0	125	370	14,36	0,09	4,34	0,10	435,94	11,97	299,60	14,64
S9-1	180	-125	650	13,91	0,09	5,12	0,10	954,02	2,70	1102,25	20,11
S9-2	0	-125	650	13,81	0,09	5,47	0,13	954,80	2,52	995,90	28,31
S9-3	-180	-125	650	13,99	0,12	5,52	0,12	911,00	42,63	810,13	83,24
S10	0	-125	950	14,86	0,10	2,51	0,20	954,47	9,37	1379,49	17,53
S11	0	-125	1250	12,53	0,23	8,41	0,44	954,67	2,65	1054,25	14,07
S12	0	-125	1550	13,75	0,11	5,74	0,11	954,03	2,31	946,61	15,61
S13	0	-125	1850	14,30	0,10	4,24	0,14	954,53	2,51	1386,51	15,18
S14	0	-125	2450	15,04	0,09	2,01	0,13	954,19	2,41	1414,82	10,29
Exaustão				15,50	0,09	0,45	0,15	954,30	2,38	1463,88	22,6

* Analisador de SO_2 na faixa de 0-4000 ppm.

Tabela B. 7 - Concentrações dos gases obtidas visualmente dos analisadores de gases do teste 0.33C4.88L0T1108.

Sonda	Posição(mm)			HORIBA			TECNOMOTOR				
				CO ₂	O ₂ .	SO ₂	CO ₂	CO	O ₂ .	NO _x	THC
	x	y	z	(%Vol.)	(%Vol.)	(ppm)	(%Vol.)	(%Vol.)	(%Vol.)	(ppm)	(ppm)
S1	0	125	20	15,63	under	706	16,5	0,10	2,99	8	84
S2	0	0	70	14,12	2,42	1440	14,1	3,38	2,30	84	16
S3	0	-125	120	14,51	2,26	1815	14,7	3,33	3,17	345	175
S4	0	125	170	15,36	2,20	1150	17,3	3,47	0,94	150	385
S5	0	0	220	14,62	3,35	693	15,0	3,34	2,43	78	1171
S6	0	-125	270	14,37	4,17	396	12,7	1,34	5,69	30	506
S7-1	0	-125	320	14,50	3,75	600	16,1	2,05	1,35	175	580
S7-2	0	0	320	14,33	4,08	552	13,7	1,89	3,70	104	703
S7-3	0	125	320	14,22	4,67	365	14,0	1,11	4,69	275	296
S8-1	0	-125	370	14,96	2,35	525	15,8	1,73	2,03	287	734
S8-2	0	0	370	14,16	4,37	632	15,1	1,70	2,74	180	722
S8-3	0	125	370	14,40	4,41	449	14,3	1,18	3,88	70	495
S9-1	180	-125	650	13,92	5,20	1354	13,7	1,38	4,40	349	489
S9-2	0	-125	650	13,85	5,57	1268	13,1	1,35	5,04	263	534
S9-3	-180	-125	650	14,05	5,52	1225	13,8	0,93	4,86	212	225
S10	0	-125	950	14,91	2,64	1638	15,8	1,38	2,05	364	442
S11	0	-125	1250	12,89	8,09	1354	10,8	0,93	8,17	310	300
S12	0	-125	1550	13,76	5,73	1276	13,6	1,19	4,87	375	386
S13	0	-125	1850	14,35	4,24	1693	15,3	1,33	2,93	374	396
S14	0	-125	2450	15,12	2,02	1710	16,0	1,41	1,69	349	432
Exaustão				15,63	0,43	1743	16,6	1,47	0,92	331	439

Tabela B. 8 - Médias e desvios das concentrações de gases captados pelo sistema de aquisição de dados do teste 0.33C4.88L1.81T1113.

Sonda	Posição(mm)			Horiba (Sistema de aquisição)							
				CO_2	$des.$	O_2	des	SO_2	des	SO_2^*	des
	x	y	z	(%Vol.)	(%Vol.)	(%Vol.)	(%Vol.)	(ppm)	(ppm)	(ppm)	(ppm)
S1	0	125	20	12,26	0,12	8,61	0,16	223,89	13,59	83,33	11,52
S2	0	0	70	15,00	0,10	2,87	0,16	206,00	11,59	65,52	9,57
S3	0	-125	120	15,95	0,09	1,66	0,16	852,53	27,64	710,00	40,02
S4	0	125	170	15,56	0,10	2,69	0,23	702,64	41,03	537,26	42,33
S5	0	0	220	16,10	0,13	3,33	0,20	580,29	52,93	439,03	51,87
S6	0	-125	270	16,41	0,17	2,21	0,16	516,24	17,67	381,56	27,56
S7	0	-125	320	15,08	0,09	3,50	0,15	440,07	11,00	301,28	13,39
S8	0	-125	370	15,33	0,14	2,39	0,23	376,62	39,67	232,98	9,32
S9-1	180	-125	650	14,55	0,18	4,11	0,20	417,72	70,17	275,00	72,13
S9-2	0	-125	650	14,87	0,16	3,54	0,30	335,96	25,95	192,97	22,90
S9-3	-180	-125	650	15,21	0,15	2,75	0,37	347,25	12,40	203,21	12,66
S10	0	-125	950	15,92	0,13	1,05	0,11	463,69	9,01	325,14	10,45
S11	0	-125	1250	15,12	0,10	3,00	0,21	457,31	6,54	313,43	8,13
S12	0	-125	1550	14,74	0,11	3,98	0,15	469,48	7,33	330,16	9,66
S13	0	-125	1850	15,23	0,11	2,80	0,30	391,84	10,15	343,36	16,22
S14	0	-125	2450	15,26	0,11	2,81	0,24	468,71	9,67	330,11	12,78
Exaustão				16,12	0,11	-	-	478,36	4,94	340,29	5,04

* Analisador de SO_2 na faixa de 0 a 4000 ppm

Tabela B. 9 - Concentrações dos gases obtidas visualmente dos analisadores de gases do teste 0.33C4.88L1.81T1113.

Sonda	Posição(mm)			HORIBA			TECNOMOTOR				
				CO ₂	O ₂ .	SO ₂	CO ₂	CO	O ₂ .	NO _x	THC
	x	y	z	(%Vol.)	(%Vol.)	(ppm)	(%Vol.)	(%Vol.)	(%Vol.)	(ppm)	(ppm)
S1	0	125	20	12,23	8,59	119	10,9	0,03	9,10	88	1
S2	0	0	70	15,13	2,78	220	16,8	0,31	2,13	88	17
S3	0	-125	120	16,12	1,61	843	18,9	0,48	1,40	128	27
S4	0	125	170	15,72	2,60	735	17,9	0,35	3,58	388	29
S5	0	0	220	15,84	4,37	405	13,6	0,52	10,69	56	326
S6	0	-125	270	16,60	2,33	519	Erro	Erro	Erro	Erro	Erro
S7	0	-125	320	15,18	3,44	426	16,3	0,52	3,61	6	367
S8	0	125	370	15,48	2,26	390	17,6	0,68	1,70	13	387
S9-1	180	-125	650	14,63	4,35	551	14,9	0,59	5,43	115	834
S9-2	0	-125	650	14,97	3,42	270	15,8	0,39	4,17	132	388
S9-3	-180	-125	650	15,40	2,43	352	16,9	0,38	2,49	325	360
S10	0	-125	950	15,90	1,50	465	16,5	0,49	3,00	294	548
S11	0	-125	1250	15,25	2,98	464	14,9	0,44	5,57	223	519
S12	0	-125	1550	14,72	4,19	463	14,8	0,51	4,97	171	616
S13	0	-125	1850	15,34	2,74	484	16,9	0,57	2,90	211	696
S14	0	-125	2450	15,38	2,65	477	17,4	0,56	1,90	264	671
Exaustão				16,35	under	479	18,5	0,58	0,54	321	689

Tabela B. 10 - Médias e desvios das concentrações de gases captados pelo sistema de aquisição de dados do teste 0.47C5.45L0T1123.

Sonda	Posição(mm)			Horiba (Sistema de aquisição)							
				CO_2	$des.$	O_2	des	SO_2	des	SO_2^*	des
	x	y	z	(%Vol.)	(%Vol.)	(%Vol.)	(%Vol.)	(ppm)	(ppm)	(ppm)	(ppm)
S1	0	125	20	9,03	0,15	10,64	0,15	478,67	52,59	312,82	53,28
S2	0	0	70	12,60	0,12	5,21	0,17	954,09	2,45	986,60	62,12
S3	0	-125	120	14,45	0,10	2,42	0,13	947,44	18,13	1010,92	126,19
S4	0	125	170	12,74	0,11	4,87	0,11	945,74	19,46	1083,74	221,37
S5	0	0	220	14,08	0,12	2,72	0,19	954,50	2,31	1245,48	78,72
S6	0	-125	270	15,18	0,15	0,05	0,32	869,31	62,34	724,07	92,54
S7	0	-125	320	13,96	0,10	2,90	0,12	633,14	68,74	481,72	72,25
S8	0	-125	370	13,64	0,09	3,65	0,15	821,12	32,82	688,71	34,77
S9-1	180	-125	650	13,67	0,17	3,75	0,31	472,94	64,04	311,14	66,64
S9-2	0	-125	650	13,73	0,10	3,63	0,16	534,36	32,31	357,58	31,51
S9-3	-180	-125	650	13,32	0,08	4,42	0,16	797,86	18,96	633,89	22,00
S10	0	-125	950	14,55	0,10	1,90	0,21	588,13	68,48	417,50	64,87
S11	0	-125	1250	11,11	0,10	8,13	0,12	581,91	14,88	412,52	17,56
S12	0	-125	1550	13,29	0,14	4,66	0,20	801,29	36,32	640,59	46,37
S13	0	-125	1850	13,57	0,12	4,07	0,17	806,47	16,10	644,64	19,58
S14	0	-125	2450	14,21	0,13	2,75	0,32	683,96	21,94	508,46	23,26
Exaustão				15,00	0,10	0,75	0,21	950,17	7,01	864,40	31,08

* Analisador de SO_2 na faixa de 0 a 4000 ppm

Tabela B. 11 - Concentrações dos gases obtidas visualmente dos analisadores de gases do teste 0.47C5.45L0T1123.

Sonda	Posição(mm)			HORIBA			TECNOMOTOR				
				CO ₂	O ₂ .	SO ₂	CO ₂	CO	O ₂ .	NO _x	THC
	x	y	z	(%Vol.)	(%Vol.)	(ppm)	(%Vol.)	(%Vol.)	(%Vol.)	(ppm)	(ppm)
S1	0	125	20	9,03	10,81	421	6,5	0,01	13,89	251	6
S2	0	0	70	12,63	5,19	1176	10,8	0,35	8,25	102	8
S3	0	-125	120	14,64	1,86	1686	15,1	1,58	3,60	81	254
S4	0	125	170	14,52	2,39	934	14,8	0,37	3,72	82	16
S5	0	0	220	12,78	4,87	1665	11,1	0,86	7,52	189	253
S6	0	-125	270	13,80	3,49	1570	14,3	1,11	3,54	131	324
S7	0	-125	320	14,00	2,87	681	12,9	1,41	5,08	152	585
S8	0	125	370	13,67	3,60	755	13,7	1,63	3,65	122	708
S9-1	180	-125	650	13,80	3,52	402	14,1	1,04	3,87	304	79
S9-2	0	-125	650	13,81	3,54	572	14,3	1,07	3,93	361	167
S9-3	-180	-125	650	13,39	4,40	774	12,7	0,57	6,44	372	23
S10	0	-125	950	14,64	1,80	664	14,9	0,81	3,09	343	70
S11	0	-125	1250	11,18	8,06	581	9,6	0,31	9,60	200	12
S12	0	-125	1550	13,35	4,55	823	12,1	0,49	6,73	258	17
S13	0	-125	1850	13,63	3,99	832	13,9	0,54	4,41	292	6
S14	0	-125	2450	14,34	2,54	719	14,5	0,60	3,80	300	11
Exaustão				14,80	1,50	891	15,2	0,58	2,88	312	14

Tabela B. 12 - Médias e desvios das concentrações de gases captados pelo sistema de aquisição de dados do teste 0.47C5.45L2.02T1123.

Sonda	Posição(mm)			Horiba (Sistema de aquisição)							
				CO_2	$des.$	O_2	des	SO_2	des	SO_2^*	des
	x	y	z	(%Vol.)	(%Vol.)	(%Vol.)	(%Vol.)	(ppm)	(ppm)	(ppm)	(ppm)
S1	0	125	20	9,60	0,19	10,08	0,20	204,25	8,55	57,23	8,20
S2	0	0	70	12,72	0,16	6,11	0,33	171,81	4,57	31,16	3,32
S3	0	-125	120	15,36	0,10	2,91	0,12	265,47	11,63	120,15	12,90
S4	0	125	170	15,06	0,17	3,15	0,28	269,47	23,07	147,08	22,13
S5	0	0	220	14,37	0,11	3,17	0,16	525,64	40,64	369,55	41,64
S6	0	-125	270	14,81	0,13	2,31	0,13	374,52	25,76	225,15	25,09
S7	0	-125	320	14,59	0,11	2,68	0,12	348,97	19,51	200,05	20,63
S8	0	-125	370	14,23	0,10	3,46	0,12	654,14	51,45	508,56	56,19
S9-1	180	-125	650	14,21	0,14	3,34	0,23	328,64	10,25	187,93	9,92
S9-2	0	-125	650	13,86	0,12	4,34	0,22	228,05	7,86	88,17	8,20
S9-3	-180	-125	650	12,77	0,14	6,60	0,25	276,17	20,09	132,35	16,47
S10	0	-125	950	14,48	0,15	3,24	0,30	195,03	9,73	58,74	7,64
S11	0	-125	1250	12,88	0,11	6,03	0,22	217,17	5,51	79,32	4,31
S12	0	-125	1550	13,30	0,15	5,22	0,30	249,53	4,58	109,13	3,87
S13	0	-125	1850	14,59	0,12	2,67	0,14	230,02	5,32	90,98	5,07
S14	0	-125	2450	14,68	0,11	2,55	0,24	305,57	14,56	159,20	13,11
Exaustão				15,19	0,12	1,34	0,22	312,16	6,49	166,70	6,64

* Analisador de SO_2 na faixa de 0 a 4000 ppm

Tabela B. 13 - Concentrações dos gases obtidas visualmente dos analisadores de gases do teste 0.47C5.45L2.02T1123.

Sonda	Posição(mm)			HORIBA			TECNOMOTOR				
				CO ₂	O ₂ .	SO ₂	CO ₂	CO	O ₂ .	NO _x	THC
	x	y	z	(%Vol.)	(%Vol.)	(ppm)	(%Vol.)	(%Vol.)	(%Vol.)	(ppm)	(ppm)
S1	0	125	20	9,75	9,95	200	7,4	0,01	13,37	235	1
S2	0	0	70	12,75	6,27	166	13,0	0,02	9,03	81	1
S3	0	-125	120	15,45	2,99	277	18,3	0,21	3,39	81	109
S4	0	125	170	15,12	3,39	310	17,3	0,15	3,27	81	91
S5	0	0	220	14,33	3,35	556	12,2	0,31	7,68	106	158
S6	0	-125	270	14,90	2,37	357	16,1	0,41	3,14	81	148
S7	0	-125	320	14,64	2,71	354	15,4	0,38	3,97	81	233
S8	0	125	370	14,26	3,51	592	15,4	0,51	3,78	81	238
S9-1	180	-125	650	14,32	3,20	340	15,8	0,80	2,93	267	277
S9-2	0	-125	650	13,94	4,35	234	14,5	0,46	4,90	176	46
S9-3	-180	-125	650	12,88	6,47	255	12,8	0,35	7,16	123	1
S10	0	-125	950	14,60	3,05	210	15,1	0,57	4,52	249	57
S11	0	-125	1250	12,96	5,97	221	11,6	0,42	8,42	385	38
S12	0	-125	1550	13,44	5,05	249	12,5	0,38	7,43	368	22
S13	0	-125	1850	14,65	2,70	237	15,3	0,49	4,01	333	26
S14	0	-125	2450	14,78	2,44	325	15,3	0,41	3,88	334	7
Exaustão				15,30	1,24	538	16,4	0,46	2,66	395	1

B.7 Distribuições granulométricas

Nas Tabelas B.14 a B.21 são apresentadas por ordem de ensaio, respectivamente, as distribuições granulométricas das amostras de particulado obtidos na sangria e no elutriado. O processo de caracterização granulométrica das amostras da sangria é o mesmo utilizado na descrição do material particulado. Para as amostras do elutriado foi utilizado um tempo de peneiramento de 1 hora, e com o uso de uma peneira adicional, perfazendo uma faixa de 0-0,297 *mm*.

Tabela B. 14 - Distribuição granulométrica do leito (sangria) do teste 0.33C4.88L0T1108.

Peneiras	Faixas granulométricas (mm)	Massa (g)	D_i (mm)	X_i	X_i/D_i (mm ⁻¹)
1	2,000-1,680	2,30	1,8400	0,002	0,001
2	1,680-1,410	3,63	1,5450	0,003	0,002
3	1,410-1,000	29,66	1,2050	0,027	0,023
4	1,000-0,710	157,58	0,8550	0,145	0,170
5	0,710-0,420	503,70	0,5650	0,465	0,823
6	0,420-0,125	293,08	0,2725	0,271	0,993
7	0,125-0,000	93,110	0,0625	0,086	1,375
Massa total=		1083,05		$\sum X_i/D_i =$	3,39
		$d_{m,mássico} =$	0,508	mm	
		$d_{m,sup.} =$	0,295	mm	

Tabela B. 15 - Distribuição granulométrica do elutriado do teste 0.33C4.88L0T1108.

Peneiras	Faixas granulométricas (mm)	Massa (g)	D_i (mm)	X_i	X_i/D_i (mm ⁻¹)
1	0,297-0,210	6,60	0,2535	0,018	0,072
2	0,210-0,177	12,30	0,1935	0,034	0,177
3	0,177-0,149	25,30	0,1630	0,070	0,431
4	0,149-0,125	30,50	0,1370	0,085	0,619
5	0,125-0,105	25,70	0,1150	0,071	0,621
6	0,105-0,074	48,80	0,0895	0,136	1,515
7	0,074-0,037	100,90	0,0555	0,280	5,051
8	0,037-0,000	109,80	0,0185	0,305	16,491
Massa total=		359,90		$\sum X_i/D_i =$	24,98
		$d_{m,mássico} =$	0,076	mm	
		$d_{m,sup.} =$	0,040	mm	

Tabela B. 16 - Distribuição granulométrica do leito (sangria) do teste 0.33C4.88L1.81T1113.

Peneiras	Faixas granulométricas (mm)	Massa (g)	D_i (mm)	X_i	X_i/D_i (mm ⁻¹)
1	2,000-1,680	9,80	1,8400	0,008	0,004
2	1,680-1,410	17,69	1,5450	0,015	0,009
3	1,410-1,000	66,75	1,2050	0,055	0,046
4	1,000-0,710	165,80	0,8550	0,137	0,160
5	0,710-0,420	466,95	0,5650	0,385	0,682
6	0,420-0,125	395,50	0,2725	0,326	1,198
7	0,125-0,000	89,30	0,0625	0,074	1,179
Massa total=		1211,79		$\sum X_i/D_i =$	3,28
		$d_{m,mássico} =$	0,532	mm	
		$d_{m,sup.} =$	0,305	mm	

Tabela B. 17 - Distribuição granulométrica do elutriado do teste 0.33C4.88L1.81T1113.

Peneiras	Faixas granulométricas (mm)	Massa (g)	D_i (mm)	X_i	X_i/D_i (mm ⁻¹)
1	0,297-0,210	2,50	0,2535	0,006	0,025
2	0,210-0,177	5,40	0,1935	0,013	0,070
3	0,177-0,149	13,00	0,1630	0,032	0,199
4	0,149-0,125	18,60	0,1370	0,046	0,339
5	0,125-0,105	19,60	0,1150	0,049	0,426
6	0,105-0,074	44,50	0,0895	0,111	1,242
7	0,074-0,037	129,40	0,0555	0,323	5,823
8	0,037-0,000	167,40	0,0185	0,418	22,599
Massa total=		400,40		$\sum X_i/D_i =$	30,72
		$d_{m,mássico} =$	0,057	mm	
		$d_{m,sup.} =$	0,033	mm	

Tabela B. 18 - Distribuição granulométrica do leito (sangria) do teste 0.47C5.45L0T1123.

Peneiras	Faixas granulométricas (mm)	Massa (g)	D_i (mm)	X_i	X_i/D_i (mm ⁻¹)
1	2,000-1,680	0,80	1,8400	0,001	0,000
2	1,680-1,410	2,20	1,5450	0,002	0,001
3	1,410-1,000	16,80	1,2050	0,014	0,012
4	1,000-0,710	76,48	0,8550	0,065	0,076
5	0,710-0,420	338,15	0,5650	0,287	0,508
6	0,420-0,125	635,22	0,2725	0,539	1,979
7	0,125-0,000	108,15	0,0625	0,092	1,469
Massa total=		1177,8		$\sum X_i/D_i =$	4,05
$d_{m,mássico} =$			0,392	mm	
$d_{m,sup.} =$			0,247	mm	

Tabela B. 19 - Distribuição granulométrica do elutriado do teste 0.47C5.45L0T1123.

Peneiras	Faixas granulométricas (mm)	Massa (g)	D_i (mm)	X_i	X_i/D_i (mm ⁻¹)
1	0,297-0,210	11,10	0,2535	0,032	0,128
2	0,210-0,177	18,10	0,1935	0,053	0,273
3	0,177-0,149	26,30	0,1630	0,077	0,471
4	0,149-0,125	30,40	0,1370	0,089	0,648
5	0,125-0,105	28,80	0,1150	0,084	0,732
6	0,105-0,074	43,90	0,0895	0,128	1,433
7	0,074-0,037	80,50	0,0555	0,235	4,237
8	0,037-0,000	103,20	0,0185	0,301	16,297
Massa total=		342,30		$\sum X_i/D_i =$	24,22
$d_{m,mássico} =$			0,083	mm	
$d_{m,sup.} =$			0,041	mm	

Tabela B. 20 - Distribuição granulométrica do leito (sangria) do teste 0.47C5.45L2.02T1123.

Peneiras	Faixas granulométricas (mm)	Massa (g)	D_i (mm)	X_i	X_i/D_i (mm ⁻¹)
1	2,000-1,680	2,22	1,8400	0,002	0,001
2	1,680-1,410	7,00	1,5450	0,006	0,004
3	1,410-1,000	51,98	1,2050	0,045	0,037
4	1,000-0,710	188,33	0,8550	0,162	0,189
5	0,710-0,420	460,86	0,5650	0,395	0,700
6	0,420-0,125	412,91	0,2725	0,354	1,300
7	0,125-0,000	42,12	0,0625	0,036	0,578
Massa total=		1165,42		$\sum X_i/D_i =$	2,81
			$d_{m,mássico} =$	0,527	mm
			$d_{m,sup.} =$	0,356	mm

Tabela B. 21 - Distribuição granulométrica do elutriado do teste 0.47C5.45L2.02T1123.

Peneiras	Faixas granulométricas (mm)	Massa (g)	D_i (mm)	X_i	X_i/D_i (mm ⁻¹)
1	0,297-0,210	8,80	0,2535	0,017	0,068
2	0,210-0,177	21,60	0,1935	0,042	0,218
3	0,177-0,149	35,90	0,1630	0,070	0,431
4	0,149-0,125	48,10	0,1370	0,094	0,687
5	0,125-0,105	41,60	0,1150	0,081	0,707
6	0,105-0,074	65,70	0,0895	0,128	1,436
7	0,074-0,037	136,00	0,0555	0,266	4,793
8	0,037-0,000	153,60	0,0185	0,300	16,238
Massa total=		511,30		$\sum X_i/D_i =$	24,58
			$d_{m,mássico} =$	0,078	mm
			$d_{m,sup.} =$	0,041	mm

B.8 Carga de material combustível nas amostras da sangria e do elutriado

Para a caracterização da carga de material combustível presente nas amostras da sangria e elutriado é utilizado um forno tubular da marca MAITEC, localizado no laboratório de química do NETeF.

O seguinte procedimento é adotado:

- 1) Aquecer o cadinho de amostragem;
- 2) Retirar do aquecimento e esperar o seu resfriamento em recipiente de retenção de umidade;
- 3) Pesar o cadinho de amostragem;
- 4) Inserir uma pequena amostra do material a ser analisado, aproximadamente 2,00g;
- 5) Pesar o cadinho e a amostra;
- 6) Inserir o cadinho com amostra em um tubo de aquecimento tubular;
- 7) Aquecer o conjunto, por um período de 20 min., até uma temperatura de 800°C e manter por mais 30 min com fluxo constante de oxigênio;
- 8) Retirar o cadinho, inserir no recipiente de retenção de umidade e esperar o seu resfriamento;
- 9) Pesar o cadinho;

Nas Tabelas B.22 a B.25 são fornecidos os resultados das cargas de material combustível no leito e no elutriado de todos os experimentos. Utilizou-se em média de três amostragens para cada ensaio.

Tabela B. 22 – Carga de material combustível presente na sangria e elutriado do teste 0.33C4.88L0T1108.

Teste	Origem	Ensaio	Cadinho (g)	Cadinho+amostra, antes do aquecimento (g)	Cadinho+amostra, após o aquecimento (g)	% massa
0.33C4.88LOT1108	Sangria	1	10,9797	12,9802	12,9445	1,78
		2	10,9798	12,9803	12,9425	1,89
		3	15,0799	17,0807	17,0439	1,84
		Média=				
	Elutriado	1	15,0800	15,3768	15,2856	30,73
		2	15,0797	15,3931	15,3017	29,16
		3	15,0798	15,4089	15,3123	29,35
		Média=				

Tabela B. 23 - Carga de material combustível presente na sangria e elutriado do teste 0.33C4.88L1.81T1113.

Teste	Origem	Ensaio	Cadinho (g)	Cadinho+amostra, antes do aquecimento (g)	Cadinho+amostra, após o aquecimento (g)	% massa
0.33C4.88L1.81T1113	Sangria	1	15,0807	17,0800	17,0466	1,67
		2	15,0808	17,0633	17,0279	1,79
		3	15,0804	17,0533	17,0193	1,72
		Média=				
	Elutriado	1	15,0806	15,5001	15,4085	21,84
		2	15,0806	15,7140	15,5569	24,80
		3	15,0813	15,5404	15,4269	24,72
		Média=				

Tabela B. 24 – Carga de material combustível presente na sangria e elutriado do teste 0.47C5.45L0T1123.

Teste	Origem	Ensaio	Cadinho (g)	Cadinho+amostra, antes do aquecimento (g)	Cadinho+amostra, após o aquecimento (g)	% massa
0.47C5.45L0T1123	Sangria	1	15,0800	17,0805	17,0617	0,94
		2	15,0795	17,0794	17,0604	0,95
		3	15,0796	17,0799	17,0611	0,94
		Média=				
	Elutriado	1	15,0804	15,3623	15,3038	20,75
		2	15,0804	15,4237	15,3552	19,95
		3	15,0800	15,4619	15,3872	19,56
		Média=				

Tabela B. 25 - Carga de material combustível presente na sangria e elutriado do teste 0.47C5.45L2.02T1123.

Teste	Origem	Ensaio	Cadinho (g)	Cadinho+amostra, antes do aquecimento (g)	Cadinho+amostra, após o aquecimento (g)	% massa
0.47C5.45L2.02T1123	Sangria	1	15,0800	16,7537	16,7415	0,73
		2	15,0800	16,9219	16,9046	0,94
		3	15,0809	17,0506	17,0334	0,87
		Média=				
	Elutriado	1	15,0809	15,5378	15,4715	14,51
		2	15,0807	15,5360	15,4667	15,22
		3	15,0810	15,6155	15,5377	14,56
		Média=				

B.9 Taxas de *overflow* ou sangria

Na Tabela B.26 é apresentada a massa de material drenado, tempo de ensaio e a taxa de *overflow* dos testes realizados.

Tabela B. 26 – Taxa de *overflow*.

TESTE	PESO DO SANGRADO (kg)	TEMPO DE ENSAIO	TAXA DE <i>OVERFLOW</i> (kg/h)
0.33C4.88L0T1108	19,0±0,5	3h 47min	5,02±0,13
0.33C4.88L1.81T1113	12,0±0,5	4h 23 min	2,74±0,11
0.47C5.45L0T1123.	18,5±0,5	2h 03min	9,02±0,24
0.47C5.45L2.02T1123	16,0±0,5	3h 05min	5,19±0,16

ANEXO A VELOCIDADE TERMINAL DE QUEDA LIVRE

A velocidade terminal de queda livre da partícula é um dos principais parâmetros utilizados nos cálculos da elutriação das partículas em reatores de leito fluidizado, além de ser empregada em áreas relacionada à sedimentação das partículas, no desenvolvimento de projetos de ciclones e em diversos processos da engenharia química. Neste trabalho ela é empregada na determinação do raio de divisão das classes de particulados *smalls* e *larges* e na avaliação do tamanho de estabilidade das bolhas no leito.

Geldart (1986b) descreve os cálculos da velocidade terminal para os regimes laminar, transitório e turbulento, e que são apresentados neste anexo.

Define-se que o número de *Reynolds* terminal de uma partícula como:

$$Re_t = \frac{2r\rho_g U_t}{\mu_g} \quad (a.1)$$

Sendo,

Re_t Número de *Reynolds* de queda livre da partícula, *adimensional*.

U_t Velocidade terminal de queda livre da partícula, *m/s*.

Para o regime laminar ($Re_t \leq 0,2$), ou de *Stokes*, a velocidade terminal da partícula é dada por:

$$U_t = \frac{2k_{st}(\rho_p - \rho_g)gr^2}{9\mu_g} \quad (a.2)$$

Sendo,

k_{st} Coeficiente da velocidade terminal no regime laminar, *adimensional*.

O coeficiente da velocidade terminal no regime laminar é fornecido como:

$$k_{st} = 0,843 \ln \left(\frac{\phi_p}{0,065} \right) \quad (\text{a.3})$$

Para o regime turbulento ($Re_t > 1000$), ou de *Newton*, a velocidade terminal de queda livre é dada pela seguinte equação:

$$U_t = 3,52 k_n \sqrt{\frac{(\rho_p - \rho_g) g r^2}{\rho_g}} \quad (\text{a.4})$$

Sendo,

k_n Coeficiente da velocidade terminal no regime turbulento, *adimensional*.

O coeficiente para velocidade terminal no regime turbulento é fornecido como:

$$k_n = \sqrt{\frac{0,43}{5,31 - 4,88 \phi_p}} \quad (\text{a.5})$$

Para o regime transitório ($0,2 < Re_t \leq 1000$), a velocidade terminal é bem descrita pelo polinômio desenvolvido por Fouda e Capes (1976), apresentado como:

$$U_t = K_{tr} \Upsilon \exp \left\{ \sum_{m=0}^5 a_m [\ln(\Omega \cdot 2r)]^m \right\} \quad (\text{a.6})$$

Sendo,

k_{tr} Coeficiente da velocidade terminal no regime turbulento, *adimensional*.

As funções Υ e Ω são definidas como:

$$\Upsilon = \left[\frac{4 (\rho_p - \rho_g) g \mu_g}{3 \rho_g^2} \right]^{1/3} \quad (\text{a.7})$$

$$\Omega = \left[\frac{4 (\rho_p - \rho_g) g \rho_g}{3 \mu_g^2} \right]^{1/3} \quad (\text{a.8})$$

Os coeficientes a_m da equação (a.6) são apresentados na Tabela An.1, enquanto o coeficiente da velocidade terminal em regime transitório é fornecido pela seguinte relação:

$$k_{tr} \approx \left(\frac{1000 - \text{Re}_t}{1000 - 0,2} \right) (k_{st} - k_n) + k_n \quad (\text{a.9})$$

Tabela An. 1 - do polinômio de Fouda e Capes (1976).

Coeficiente a_m	Valor
$a_0=$	-1,37323
$a_1=$	2,06962
$a_2=$	-0,453219
$a_3=$	-0,0334612
$a_4=$	-0,00745901
$a_5=$	0,00249580

ANEXO B ALTURA DE DESENGAJAMENTO DE TRANSPORTE (TDH)

A altura de desengajamento de transporte (*transport disengaging height*), ou TDH, é referenciada na literatura como a máxima altura alcançada no *freeboard* de uma partícula de bitola grosseira, ou como a altura a partir a qual a concentração de partículas em ascensão mantém-se constante ou não possua variação significativa (GELDART, 1986b).

Neste trabalho, o TDH é definido como a máxima altura alcançada no *freeboard* pela partícula *larges* de diâmetro médio no leito, e qualquer partícula que ultrapasse esta altura, seja ela da classe *critical fines*, *smalls* ou *larges*, não retorne mais para o leito. Utiliza-se o procedimento descrito em Morsi e Alexander (1972) para determinação desta altura, a qual é obtida através de um balanço de *momentum* aplicado em uma partícula movendo-se verticalmente através do gás. Assume-se que a partícula seja esférica, ejetada verticalmente na superfície do leito, e que não ocorram interações entre partículas.

Logo, um balanço de *momentum* sobre esta partícula é dado como:

$$\left[\begin{matrix} \text{Força de} \\ \text{aceleração} \end{matrix} \right] = \left[\begin{matrix} \text{Força} \\ \text{ascensional} \end{matrix} \right] + \left[\begin{matrix} \text{Força} \\ \text{gravitacional} \end{matrix} \right] \pm \left[\begin{matrix} \text{Força de} \\ \text{arraste} \end{matrix} \right]$$

Que resultam na seguinte equação:

$$\frac{d}{dt} \left[U_p(z) \right] = \pm \frac{3}{4} C_d \frac{\rho_g (U_F - U_p)^2}{\rho_p 2r} - \frac{(\rho_p - \rho_g)}{\rho_p} g \quad (\text{b.1})$$

Sendo,

C_d Coeficiente de arrasto, *adimensional*.

Morsi e Alexander (1972) propõem que o coeficiente seja dado como:

$$C_d = \frac{k_1^*}{\text{Re}_p} + \frac{k_2^*}{\text{Re}_p^2} + k_3^* \quad (\text{b.2})$$

Sendo,

k_1^*, k_2^*, k_3^* Constantes da equação do coeficiente de arrasto, *adimensional*.

Re_p Número de Reynolds da partícula no *freeboard*, *adimensional*.

As constantes do coeficiente de arrasto são fornecidas em função de cada faixa de número de *Reynolds* como apresentado na Tabela An.2. O número de *Reynolds* de partícula é dado como:

$$Re_p = \pm \frac{\rho_g (U_F - U_p) 2r}{\mu_g} \quad (b.3)$$

Tabela An. 2 - Constantes do coeficiente de arrasto em função do *Reynolds* da partícula (MORSI e ALEXANDER, 1972)

Re_p	k_1^*	k_2^*	k_3^*
<0,1	24	0	0
0,1-1	22,73	0,0903	3,69
1-10	29,1667	-3,8889	1,222
10-100	46,5	-116,67	0,6167
100-1000	98,33	-2778	0,3644
1000-5000	148,62	-47500	0,357

Nas equações (b.1) e (b.3) o sinal positivo e negativo nos fornece a orientação da força de arrasto, que hora é negativa desfavorecendo a ascensão da partícula, ou positiva favorecendo sua ascensão. O sinal positivo ocorre quando a velocidade da partícula é menor que a velocidade dos gases de arraste, enquanto o sinal negativo, no caso contrário.

Substituindo as equações (b.2) e (b.3) na equação (b.1) e expressando a derivada da velocidade no tempo em função da altura obtemos que o balanço do *momentum* seja dado como:

$$U_p(z) \frac{dU_p(z)}{dz} = \phi_1 - U_p(z) \phi_2 + \phi_3 [U_p(z)]^2 \quad (b.4)$$

Onde os termos ϕ_1 , ϕ_2 e ϕ_3 são dado por:

$$\phi_1 = k_1^* \left(\frac{3}{4} \frac{\mu_g U_F}{\rho_p (2r)^2} \right) \pm k_2^* \left(\frac{3}{4} \frac{\mu_g^2}{\rho_g \rho_p (2r)^3} \right) \pm k_3^* \left(\frac{3}{4} \frac{U_F^2 \rho_g}{\rho_p (2r)} \right) - \frac{(\rho_p - \rho_g)g}{\rho_p} \quad (\text{b.5})$$

$$\phi_2 = k_1^* \left(\frac{3}{4} \frac{\mu_g}{\rho_p (2r)^2} \right) \pm k_3^* \left(\frac{3}{2} \frac{U_F \rho_g}{\rho_p (2r)} \right) \quad (\text{b.6})$$

$$\phi_3 = \pm k_3^* \left(\frac{3}{4} \frac{\rho_g}{\rho_p (2r)} \right) \quad (\text{b.7})$$

Morsi e Alexander (1972) obtiveram soluções analíticas para cada faixa do número de *Reynolds*, onde as constantes do coeficiente de arrasto permanecem invariáveis, e o incremento de altura é dado na seguinte forma:

Para $\text{Re}_p > 0,1$:

$$z_{n+1} = z_n + \frac{1}{\phi_2} (U_{p,n} - U_{p,n+1}) - \frac{\phi_1}{\phi_2^2} \log \left| \frac{\phi_1 - \phi_2 U_{p,n+1}}{\phi_1 - \phi_2 U_{p,n}} \right| \quad (\text{b.8})$$

Para $\text{Re}_p < 0,1$, e definindo $\phi_0 = \phi_2^2 - 4\phi_1\phi_3$,

Com $\phi_0 = 0$

$$z_{n+1} = z_n + \frac{1}{\phi_3} \left\{ \frac{1}{2} \text{Log} \left[\frac{\phi_3 U_{p,n+1}^2 - \phi_2 U_{p,n+1} + \phi_1}{\phi_3 U_{p,n}^2 - \phi_2 U_{p,n} + \phi_1} \right] + \frac{2\phi_2\phi_3(U_F - U_{p,n})}{(2\phi_3 U_{p,n+1} - \phi_2)(2\phi_3 U_{p,n} - \phi_2)} \right\} \quad (\text{b.9})$$

Com $\phi_0 > 0$:

$$z_{n+1} = z_n + \frac{1}{\phi_3} \left\{ \frac{1}{2} \text{Log} \left[\frac{\phi_3 U_{p,n+1}^2 - \phi_2 U_{p,n+1} + \phi_1}{\phi_3 U_{p,n}^2 - \phi_2 U_{p,n} + \phi_1} \right] + \right. \\ \left. + \frac{\phi_2}{\phi_0^{0,5}} \text{Log} \left[\frac{(2\phi_3 U_{p,n+1} - \phi_2 - \phi_0^{0,5})(2\phi_3 U_{p,n} - \phi_2 + \phi_0^{0,5})}{(2\phi_3 U_{p,n+1} - \phi_2 + \phi_0^{0,5})(2\phi_3 U_{p,n} - \phi_2 - \phi_0^{0,5})} \right] \right\} \quad (\text{b.10})$$

Com $\phi_0 < 0$:

$$z_{n+1} = z_n + \frac{1}{\phi_3} \left\{ \frac{1}{2} \text{Log} \left[\frac{\phi_3 U_{p,n+1}^2 - \phi_2 U_{p,n+1} + \phi_1}{\phi_3 U_{p,n}^2 - \phi_2 U_{p,n} + \phi_1} \right] + \right. \\ \left. + \frac{\phi_2}{(-\phi_0)^{0,5}} \left[\arctan \left(\frac{2\phi_3 U_{p,n+1} - \phi_2}{(-\phi_0)^{0,5}} \right) - \arctan \left(\frac{2\phi_3 U_{p,n} - \phi_2}{(-\phi_0)^{0,5}} \right) \right] \right\} \quad (\text{b.11})$$

Sendo z_n e $U_{p,n}$, respectivamente, a altura e velocidade de contorno de cada faixa de *Reynolds*, e para $n=0$ a altura inicial, z_0 , é zero e a velocidade da partícula, $U_{p,0}$, é dada pela equação (3.57)

A altura de desengajamento de transporte de uma partícula lages é obtida pela aplicação das equações (b.8) a (b.11), para cada faixa de número de Reynolds apresentada na Tabela An.2, até que $U_p(z_{n+1}) = U_{p,n+1}$ seja zero.