



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

## EQUILÍBRIO QUÍMICO: MODELAGEM MATEMÁTICA DOS PROCESSOS DE COMBUSTÃO DO ANTRACITO<sup>1</sup>

Silvana Fontana<sup>2</sup>, A. Patricia Spilimbergo<sup>3</sup>.

<sup>1</sup> Projeto de Iniciação Científica

<sup>2</sup> Bolsista PIBIC/UNIJUI, aluna do curso de Licenciatura em Matemática da Unijui.

<sup>3</sup> Professora Orientadora, Mestre em Matemática, Curso de Matemática - Licenciatura, UNIJUI.

Equilíbrio Químico: Modelagem Matemática dos Processos de Combustão do Antracito1

Silvana Fontana2; A. Patricia Spilimbergo3

1 Projeto de Iniciação Científica

2Aluna do Curso de Matemática - Licenciatura, UNIJUI, bolsista PIBIC/UNIJUI, silvana.fontana@unijui.edu.br

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

### Introdução

A disponibilidade de grandes jazidas de carvão mineral e o baixo custo do carvão vegetal conferem a esse combustível um papel relevante. O carvão (um material sólido, poroso, de fácil combustão e capaz de gerar grandes quantidades de calor) é uma alternativa à manutenção dos atuais níveis de consumo de energia. Observa-se esse fato, especialmente nos países desenvolvidos, onde a pesquisa sobre a utilização deste combustível tem recebido especial atenção de pesquisadores e órgãos governamentais. O Brasil acompanha esta tendência mundial, e aqui também estão sendo realizadas pesquisas de natureza tanto experimental como teórica, no sentido do aproveitamento desta fonte de energia.

Em particular, um problema teórico é a determinação das propriedades termodinâmicas e termofísicas dos produtos de combustão do carvão. Estas propriedades são necessárias para projetar instalações onde se realiza a queima desse combustível.

Assim, o presente trabalho objetiva calcular as propriedades e a composição dos produtos resultantes da combustão do carvão do tipo antracito, bem como avaliar a influência da combustão incompleta deste combustível, considerando que 2,5% do carbono constante na sua composição não participam do processo de combustão, levando em conta que o meio reagente se encontra no estado de equilíbrio químico.

### Metodologia



**Modalidade do trabalho:** Relatório técnico-científico

**Evento:** XXI Seminário de Iniciação Científica

Para o cálculo da composição e das propriedades se utiliza um modelo que considera o meio reagente no estado de equilíbrio químico (ALEMASSOV, DREGALIN e TISHIN, 1999) em conjunto com o método do “Meio Local Reagente” (SPILIMBERGO, KRIOUKOV e GABBI, 2011). Entre as principais propriedades dos produtos de combustão calculadas pode-se citar: temperatura, calor específico, massa molecular média, viscosidade, condutibilidade térmica, frações molares, entropia, entalpia, fração mássica total das substâncias condensadas, entre outras.

No modelo Alemassov, Dregalin e Tishin (1999) são utilizados os conceitos descritos a seguir.

- Combustível e oxidante, que são caracterizados pelo número relativo de átomos que cada componente contém.
- Coeficiente de excesso do oxidante, que caracteriza a relação entre os reagentes (combustível e oxidante). Este valor representa o excesso ou falta de oxidante no processo de combustão.
- Bipropelente, que é o resultado da união do combustível e do oxidante.
- Produtos de combustão, que são as substâncias formadas no resultado da queima do combustível, podendo ser gasosas ou condensadas.

Além disso, o modelo de equilíbrio químico (ALEMASSOV, DREGALIN e TISHIN, 1999) é constituído basicamente por três tipos de equações, descritas a seguir.

- 1) Equação da dissociação das moléculas nos átomos, que fornecesse um número de equações igual ao número de moléculas do meio reagente.
- 2) Equação da conservação da quantidade de átomos nos produtos de combustão, que fornecesse um número de equações igual ao número de átomos que constituí o meio reagente.
- 3) Equação de Dalton.

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

Além disso, nos processos de combustão real, alguma parte de um dos componentes (combustível ou oxidante) pode não participar do processo de combustão, ou reagir na situação de falta de um deles, sendo que ao mesmo tempo, as temperaturas de ambos meios reagentes são iguais. Para levar em consideração esse efeito, foi considerado o método do Meio Local Reagente (MLR).

Tradicionalmente, a avaliação destas alterações é realizada com base na diminuição da entalpia do bipropelente, admitindo que, parte da energia “desaparece”. Este procedimento pode avaliar a temperatura dos produtos de combustão, mas apresenta erros consideráveis, na composição dos produtos de combustão. O método do MLR não apresenta esta falha.

## Resultados e Discussão

Utilizando o aplicativo correspondente ao modelo Alemassov, Dregalin e Tishin (1999), foram realizados vários cálculos para a determinação das propriedades e da composição dos produtos de combustão do antracito. As informações necessárias foram retiradas da literatura (CHOI, PARK e SON, 1994) e consistiram na composição desse tipo de carvão, ou seja, o percentual mássico das substâncias químicas que compõem o antracito, bem como o seu poder calorífico e a composição da cinza. Logo após estes dados foram transformados na escala utilizada pelo modelo de equilíbrio químico considerado.

# SALÃO DO CONHECIMENTO

UNIJUÍ 2013  
Ciência • Saúde • Esporte



**Modalidade do trabalho:** Relatório técnico-científico

**Evento:** XXI Seminário de Iniciação Científica

Os cálculos foram realizados para pressão de 1atm, para o coeficiente de excesso do oxidante variando de 0,1 a 10 e o meio reagente total incluiu um total de 70 substâncias, entre átomos, moléculas e radicais. No caso da simulação da combustão incompleta foi considerado que 2,5% do carbono não participa das reações com o oxidante, formando o meio local.

Em relação à variação da temperatura e da massa molecular média dos produtos de combustão, tanto para a combustão completa como para a combustão incompleta praticamente não houve variação. Devido ao alto valor do poder calorífico, a temperatura máxima é bastante alta, em torno de 2240K. A massa molecular média, tanto para a combustão completa como incompleta possuem um máximo e um mínimo, os quais são consequências do CO<sub>2</sub> e da evolução das fases condensadas.

O calor específico “congelado” praticamente não se altera em todo intervalo pesquisado da variação do coeficiente de excesso do oxidante e a diferença entre os meios reagentes (combustão completa e combustão incompleta) não é visível. Já os calores específicos equilibrados, são altos para o coeficiente de excesso do oxidante variando de 0,1 a 0,3. Nesse mesmo intervalo de variação do coeficiente de excesso do oxidante observam-se alterações consideráveis nas substâncias H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CO, CO<sub>2</sub> e C\* (carbono condensado), que são os responsáveis pelos valores elevados calor específico equilibrado (tanto para a combustão completa como a incompleta). Para o coeficiente de excesso do oxidante igual a 1 (combustão completa) e igual a 0,8 (combustão incompleta) existem outros máximos para o calor específico equilibrado, que são provocados por altas temperaturas (mais que 2200K) quando se inicia a dissociação de moléculas (radicais) em átomos, fato que exige gastos consideráveis de energia.

Com relação às frações molares das substâncias poluentes “C\*+C<sub>x</sub>\*” e NO, em ambos os meios reagentes, os máximos do NO correspondem aos máximos das temperaturas. Observa-se que estes valores são consideravelmente mais alto do que as concentrações do NO emitidas em instalações reais. A principal causa desta divergência está nas velocidades relativamente pequenas na formação do NO, pois o modelo de equilíbrio químico é baseado na hipótese de que as velocidades das reações químicas são infinitamente grandes.

## Conclusões

- Baseando-se no modelo de equilíbrio químico (ALEMASSOV, DREGALI e TISHIN, 1999), com a aplicação do método do Meio Local Reagente foram pesquisadas as propriedades termodinâmicas e termofísicas de meio reagente “carvão + ar”, variando o coeficiente de excesso do oxidante e considerando na combustão incompleta, que 2,5% do carbono não participamos do processo de combustão.

- Foi investigada a influências do coeficiente de excesso do oxidante e também a influência da combustão incompleta do carbono no processo de combustão nas principais características dos produtos de combustão. Foi observado: a existência de grandes valores para o calor específico equilibrado quando coeficiente de excesso do oxidante foi menor do que 0,5; o caráter peculiar da alteração das massas moleculares (com um mínimo e um máximo); particularidades do





**Modalidade do trabalho:** Relatório técnico-científico

**Evento:** XXI Seminário de Iniciação Científica

comportamento das substâncias CO, H<sub>2</sub> e O<sub>2</sub> nos meios reagentes da combustão completa e incompleta (devido à dissociação).

**Palavras-Chaves:** Combustão, Carvão, Equilíbrio Químico, Antracito

**Agradecimentos**

Ao Programa de Iniciação Científica da UNIJUÍ – PIBIC/UNIJUÍ pela bolsa recebida.

**Referências Bibliográficas**

ALEMASSOV, V. E.; DREGALIN, A. F.; TISHIN, A. P.. Teoria dos propulsores. Moscou: Mashinostroenie, 1999.

CHOI, J. H.; PARK, Y. S.; SON, J. E.. Fluidized Bed Combustion of Low Grade Anthracite: Effect of Entrained on Combustion Efficiency. In: Proceedings of First Annual Pittsburgh Coal Conference, Pittsburgh, Pennsylvania, 1994. p. 429 – 437.

SPILIMBERGO, A. P.; KRIOUKOV, V. G.; GABBI, R.. Carvão + Pedra Calcária: aplicação do modelo de equilíbrio químico na determinação das características dos produtos de combustão. Conferência Brasileira de Dinâmica, Controle e Aplicações, 10. Águas de Lindóia, 2011. 1 CD-ROOM.