

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ENGENHARIA DE ENERGIA

**OBTENÇÃO DOS PARÂMETROS CINÉTICOS DE COMBUSTÍVEIS SÓLIDOS A
PARTIR DE SIMULAÇÃO NUMÉRICA**

por

Vítor de Souza Lumertz

Monografia apresentada à Comissão de Graduação do Curso de Engenharia de Energia da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos para obtenção do diploma de Bacharel em Engenharia de Energia.

Porto Alegre, abril de 2022.



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
ENGENHARIA DE ENERGIA

**OBTENÇÃO DOS PARÂMETROS CINÉTICOS DE COMBUSTÍVEIS SÓLIDOS A
PARTIR DE SIMULAÇÃO NUMÉRICA**

por

Vítor de Souza Lumertz

ESTA MONOGRAFIA FOI JULGADA ADEQUADA COMO PARTE DOS
REQUISITOS PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE
BACHAREL EM ENGENHARIA DE ENERGIA.
APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELA BANCA EXAMINADORA

Prof. Flávio Becon Lemos
Coordenador do Curso de Engenharia de Energia

Orientador: Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira

Banca examinadora:

Prof. Dr. Andrés Armando Mendiburu Zevallos – DEMEC / UFRGS

Prof. Dr. Paulo Smith Schneider – DEMEC / UFRGS

Prof^a. Dra. Thamy Cristina Hayashi – DEMEC / UFRGS

Porto Alegre, 22 de abril de 2022.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a todos que trabalham na UFRGS e que de alguma forma contribuem para a excelente instituição de ensino que a universidade é, aos professores dos quais fui aluno, pelo conhecimento transmitido e principalmente para meu professor orientador, Fernando Pereira, e doutora Juliana Pohlmann pelo conhecimento técnico sobre o presente trabalho que aprendi com eles.

LUMERTZ, V **Obtenção dos Parâmetros Cinéticos de Combustíveis Sólidos a partir de Simulação Numérica**. 2022. 29 folhas. Monografia (Trabalho de Conclusão do Curso em Engenharia de Energia) – Escola de Engenharia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2022.

RESUMO

Este trabalho tem como finalidade desenvolver um código no Matlab[®] que simula unidimensionalmente a combustão de carvão ou biomassa em um forno de queda livre (DTF). O principal objetivo do código, além de estudar os processos físicos e químicos envolvidos na combustão, é determinar os parâmetros cinéticos do combustível em análise, os quais são obtidos através de um processo de otimização com um algoritmo genético. Esse processo é feito variando os parâmetros cinéticos, de forma que a diferença entre o *burnout* calculado no código e o obtido experimentalmente seja a menor tolerável. Para determinar o *burnout* ao longo do forno, é necessário simular toda a trajetória das partículas e, por conta disso, o método lagrangeano foi adotado. A obtenção dos parâmetros cinéticos a partir de modelagem numérica é um método alternativo ao da curva de Arrhenius (procedimento tradicional). A abordagem deste trabalho permite considerar uma distribuição granulométrica da amostra, ao invés de apenas um único tamanho característico, fazendo com que os parâmetros calculados sejam mais confiáveis para representar os fenômenos do experimento. O código reproduz resultados muito semelhantes aos encontrados na literatura e é utilizado para calcular os parâmetros cinéticos de um carvão betuminoso. O estudo ainda analisa o efeito dos processos de secagem e fragmentação das partículas nos resultados, tais como os parâmetros cinéticos otimizados, curva de *bornout* e evolução da distribuição granulométrica. A secagem possui pouca influência nos resultados e a hipótese de secagem instantânea pode ser considerada. Já o processo de fragmentação se mostra relevante para a previsão da evolução da distribuição granulométrica ao longo do forno e pode levar a uma diferença de 10% nos valores dos parâmetros cinéticos calculados, se comparado quando a fragmentação é desconsiderada. Além disso, as curvas de *bornout* apresentam um desvio menor do que 2% com relação aos dados experimentais. Com isso, o código desenvolvido neste trabalho se mostra uma ferramenta importante para o estudo e compreensão da combustão de combustíveis sólidos, de forma a auxiliar *softwares CFD (computational fluid dynamics)* com a obtenção dos parâmetros cinéticos a partir de uma abordagem numérica.

PALAVRAS-CHAVE: Parâmetros cinéticos, Simulação numérica, DTF, Combustão.

LUMERTZ, V **Determination of the Kinetic Parameters of Solid Fuels from Numerical Simulation**. 2022. 29 folhas. Monografia (Trabalho de Conclusão do Curso em Engenharia de Energia) – Escola de Engenharia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2022.

ABSTRACT

This work aims to develop a code in Matlab[®] that simulates one-dimensionally the coal or biomass combustion in a drop tube furnace (DTF). The main objective of the code, in addition to studying the physical and chemical processes involved in the combustion, is to determine the kinetic parameters of the fuel in analysis, which are obtained through an optimization process with a genetic algorithm. This process is done by varying the kinetic parameters, so that the difference between the burnout calculated in the code and that obtained experimentally is as small as possible. To determine the burnout along the furnace, it is necessary to simulate the entire trajectory of the particles and, because of that, the Lagrangean method was adopted. Obtaining kinetic parameters from numerical modeling is an alternative method to that of Arrhenius plot (traditional procedure). The approach of this work allows to consider a granulometric distribution of the sample, instead of just a single characteristic size, so the calculated parameters are more reliable to represent the experiment's phenomena. The code reproduces results very similar to those found in the literature and is used to calculate the kinetic parameters of a bituminous coal. The study still analyzes the effect of drying and fragmentation of the particles processes in the results, such as the optimized kinetic parameters, burnout curve and particle size distribution (PSD) evolution. The drying has low influence in the results and the hypothesis of instantaneous drying might be considered. The fragmentation process is relevant for the prediction of the PSD evolution along the furnace and can lead to a difference of 10% in the calculated values for the kinetic parameters, if compared when the fragmentation is not taken into account. Furthermore, the burnout curves show a deviation of less than 2% with respect to the experimental data. Thus, the code developed in this work proves to be an important tool for the study and understanding of solid fuel combustion, in order to assist CFD (computational fluid dynamics) softwares to obtain kinetic parameters from a numerical approach.

KEYWORDS: Kinetic parameters, Numerical simulation, DTF, Combustion.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	2
2.1	Balanço de forças	2
2.2	Combustão de uma partícula	3
2.2.1	Secagem	3
2.2.2	Desvolatilização	4
2.2.3	Oxidação do carbono fixo	4
2.3	Balanço de energia	4
2.4	Variação do diâmetro e da massa específica	5
2.5	Fragmentação	6
2.6	Pressão parcial e difusão de oxigênio	8
3	METODOLOGIA	9
3.1	Dados experimentais	9
3.2	Simplificações	9
3.3	Processo de otimização dos parâmetros cinéticos	9
3.4	Validação do código	10
3.4.1	Velocidade terminal	10
3.4.2	Aquecimento das partículas	11
3.4.3	Comparação com o trabalho de Ballester e Jiménez (2005)	12
3.5	Aplicação do modelo em um carvão betuminoso	14
4	RESULTADOS	15
5	CONCLUSÃO	21

1 INTRODUÇÃO

A produção de energia elétrica a partir da combustão de combustíveis sólidos ainda é predominante no mundo. Segundo a IEA, 35% da energia elétrica mundial em 2020 foi gerada a partir de carvão. Alternativamente a essa fonte, a biomassa, por ser renovável e muitas vezes proveniente de restos da agricultura, produz menos impactos ambientais. No Brasil, a biomassa é uma fonte importante tanto para a matriz elétrica, representando cerca de 9% (IEA), quanto para a produção de etanol e biodiesel, utilizados no transporte. Este panorama mostra a importância do aprofundamento dos estudos dos fenômenos envolvidos no processo de combustão. Assim, é possível aumentar a eficiência das usinas termelétricas, por exemplo, trazendo benefícios econômicos, sociais e ambientais.

Existe um crescimento da utilização de CFD (*computational fluid dynamics*) para simular, prever e otimizar o funcionamento dos geradores de vapor encontrados nas termelétricas. Sendo assim, é importante que se determine, entre outras características, os parâmetros cinéticos de cada tipo de carvão e biomassa, já que esses são dados de entrada dos modelos de combustão de CFD. Silva *et al* (2010) utilizaram o *software* CFX® para simular uma usina térmica a carvão no sul do Brasil com diferentes tipos de carvão. Com o estudo foi possível determinar os parâmetros de operação ótimos para cada tipo de carvão, diminuindo os custos de produção de energia elétrica e reduzindo as emissões de poluentes. Naser *et al* (2011) também realizaram estudos com CFD para analisar a operação de uma usina termelétrica real, de 100 kW. O autor analisou diferentes ambientes de combustão (ar e oxi-combustão), estabilidade de chama e a geometria do queimador. Em 2015, Naser publicou outro artigo com modelagem CFD, agora também discutindo os efeitos causados pela mistura de carvão e biomassa em uma planta industrial de larga escala. Amell *et al* (2020) avaliaram as diferenças entre resultados de simulações de CFD 3D e 2D em um queimador de tubo radiante e chegaram à conclusão de que simulações 2D podem ser úteis para prever a operação desses queimadores, diminuindo o custo computacional com relação às simulações 3D.

Os parâmetros cinéticos, necessários para as simulações CFD, são formados, neste trabalho, pelo fator pré-exponencial e pela energia de ativação. Sua forma de obtenção é dependente de experimentos, os quais geralmente são realizados em TGA (*thermogravimetric analyzer*) ou em fornos de queda livre (DTF - *drop tube furnace*). Enquanto um TGA queima o combustível lentamente, com taxas de aquecimento na ordem de 100 °C/min, e com tempos de residência grandes (minutos ou horas), um DTF fornece taxas de aquecimento elevadas (10⁴-10⁵ °C/min) com tempos de residência curtos (na ordem de centenas de milissegundos). Isto mostra que é vantajoso fazer os experimentos em DTF, já que eles fornecem condições mais próximas às obtidas em equipamentos industriais. Os experimentos realizados em TGA, contudo, ainda são úteis para comparar a reatividade dos combustíveis por serem padronizados (Zimmer, 2012).

O método mais clássico utilizado para a obtenção dos parâmetros cinéticos é a partir da curva de Arrhenius, no qual apenas os resultados experimentais são considerados. Isso faz com que várias incertezas influenciem nos parâmetros obtidos. Por exemplo, nesse método, todas as partículas da amostra de combustível são consideradas com o mesmo tamanho, porém esta hipótese não representa a realidade, por mais estreita que seja a faixa da distribuição granulométrica. As taxas de reações são fortemente afetadas pela área de superfície da partícula, de modo que uma análise que considere toda a faixa de tamanhos é mais apropriada.

Ballester e Jiménez (2005) desenvolveram um modelo numérico alternativo para contornar esses problemas. A partir de uma abordagem numérica, é possível modelar os principais fenômenos físicos e químicos separadamente e com mais detalhamento. Assim, pode-se calcular toda a trajetória da partícula

ao longo do forno e determinar os parâmetros cinéticos através de um processo de otimização, no qual se minimiza a diferença entre os resultados experimentais e calculados. Os autores concluíram que não é possível representar satisfatoriamente os resultados experimentais ao considerar um único tamanho de partícula. É importante levar em conta toda a distribuição granulométrica. Esse método, segundo Zimmer (2012) é menos sensível às incertezas dos experimentos e admite modelos mais complexos, enquanto que o método da curva de Arrhenius necessita de uma solução explícita do problema.

Em 2007, Jiménez e Ballester propuseram uma alteração no modelo e adicionaram o processo de fragmentação das partículas. Os novos resultados ficaram ainda mais próximos dos resultados experimentais, o que significa que os novos parâmetros cinéticos obtidos são mais confiáveis para representar os fenômenos do experimento.

Este trabalho tem como objetivo desenvolver um código no Matlab[®] que simula experimentos realizados em fornos DTF, para determinar os parâmetros cinéticos de um carvão betuminoso e avaliar o efeito da secagem e fragmentação das partículas nos resultados obtidos.

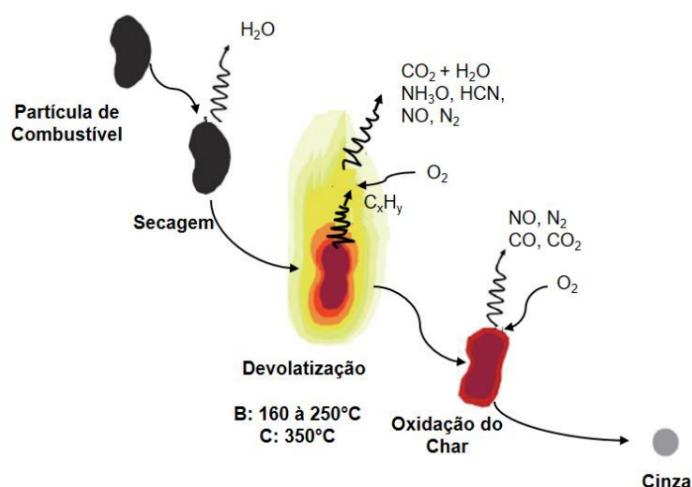
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

A modelagem unidimensional da combustão de combustível sólido em um DTF descrita por Ballester e Jiménez (2005 e 2007) é apresentada nesta seção, assim como as metodologias utilizadas para a validação do código desenvolvido.

A abordagem lagrangeana foi utilizada para resolver o problema, o que significa que a trajetória de cada partícula ao longo do forno é calculada. O modelo poderia ser resolvido com a abordagem euleriana - Método dos Volumes Finitos (MVF) (Zimmer, 2012), onde divide-se o forno em vários volumes de controle e calcula-se as propriedades de cada um desses volumes. A malha empregada por Zimmer tem 120 mil volumes e suas simulações demoraram 70 segundos, aproximadamente, considerando todas as partículas com o mesmo diâmetro inicial, de 52,2 μm . Com a mesma consideração, o código desenvolvido neste trabalho consegue convergir com um tempo de simulação menor do que 5 segundos. A maioria dos códigos comerciais, como o CFX[®] e o Fluent[®] da Ansys[®], também utiliza o MVF para a solução dos sistemas de equações diferenciais. Stradioto (2019) fez simulações de experimentos realizados em um DTF com estes *softwares* e o tempo necessário para a convergência foi de aproximadamente 36 horas. O tempo é maior porque a modelagem não é unidimensional neste caso.

A Figura 1 ilustra os estágios de combustão de uma partícula de combustível sólido, os quais serão discutidos mais detalhadamente a seguir em conjunto com o equacionamento dos diferentes fenômenos físicos e químicos envolvidos no processo de combustão.

Figura 1: Estágios de combustão de uma partícula de combustível.



Fonte: Stradioto (2019).

2.1 Balanço de forças

A segunda Lei de Newton é utilizada para fazer um balanço de forças sobre a partícula e descrever seu movimento de queda ao longo do DTF, determinando sua velocidade e posição em um determinado instante de tempo. São consideradas as forças da gravidade, empuxo e arrasto sobre a partícula. Assim, temos que

$$\frac{\pi}{6} d_p^3 \rho_p \frac{du_p}{dt} = \frac{\pi}{6} d_p^3 g (\rho_p - \rho_g) - 3\pi\mu d_p (u_p - u_g) \quad (1)$$

em que d , ρ , u representam, respectivamente, diâmetro (m), massa específica (kg/m^3) e velocidade (m/s). Os subíndices p e g são referentes, respectivamente, à partícula e ao gás. μ é a viscosidade dinâmica do gás ($\text{kg m}^{-1}\text{s}^{-1}$) e g é a aceleração da gravidade, igual a $9,81 \text{ m/s}^2$.

O termo do lado esquerdo da equação é a taxa de variação da quantidade de movimento da partícula. O primeiro termo do lado direito é a diferença entre as forças da gravidade e de empuxo enquanto que o segundo termo representa a força de arrasto a partir da velocidade relativa entre a partícula e o gás, assumindo o regime de Stokes (escoamento laminar), já que os números de Reynolds típicos dos experimentos em DTF são inferiores a 2300, valor limite entre escoamento laminar e turbulento (Bergman 2014).

2.2 Combustão de uma partícula

Inicia-se o processo de combustão com o aumento de temperatura da partícula e consequentemente com o processo de secagem, durante a qual toda a umidade é evaporada. Posteriormente, a partícula continua recebendo calor do meio e o processo endotérmico de desvolatilização começa, na qual os voláteis são liberados em forma de gás e queimam próximo à partícula, formando uma chama. Por fim, ocorre a oxidação do carbono fixo, também chamado de *char*.

Estes três processos podem ocorrer simultaneamente, principalmente quando a taxa de aquecimento é alta, condição observada em experimentos em fornos DTF e em geradores de vapor.

2.2.1 Secagem

A secagem foi considerada instantânea no modelo de Ballester e Jiménez (2005), pois o carvão estudado continha pouca umidade (1,46%). Wang (2014) implementou o processo considerando que a secagem começa quando a partícula atinge 100°C. Também supõe-se que, durante o processo, todo o calor transferido por convecção e radiação é absorvido pela água no processo de mudança de fase. Desta maneira, Wang (2014) descreveu o consumo de umidade como

$$\frac{dm_{H_2O}}{dt} = \frac{-(Q_{conv} + Q_{rad})}{h_{fg}} \quad (2)$$

em que Q_{conv} e Q_{rad} são respectivamente as taxas de transferência de calor por convecção e radiação (W) e h_{fg} é a entalpia de vaporização da água a 100°C, igual a 2257,0 kJ/kg.

2.2.2 Desvolatilização

A desvolatilização é o processo de desprendimento dos voláteis da partícula em forma de gás. Sua taxa, $\frac{dV}{dt}$, foi modelada por Ballester e Jiménez (2005) como

$$\frac{dV}{dt} = -k_V V \quad (3)$$

$$k_V = A_V \cdot \exp\left(\frac{-E_V}{R \cdot T_p}\right) \quad (4)$$

em que V é a fração mássica de voláteis com relação à massa total inicial da partícula (adim); k_V , A_V e E_V são, respectivamente, o coeficiente cinético (s^{-1}), o fator pré-exponencial (s^{-1}) e a energia de ativação para a desvolatilização (J/mol); T_p é a temperatura da partícula (K) e R é a constante universal dos gases perfeitos, igual a 8,314 J mol⁻¹ K⁻¹.

2.2.3 Oxidação do carbono fixo

Os modelos mais simples de oxidação do carbono fixo consideram que as reações químicas ocorrem apenas na superfície da partícula. Assim, é desconsiderado o fato de que as partículas apresentam estrutura porosa e que, conseqüentemente, o oxigênio pode ser difundido para o interior das mesmas, ocasionando a combustão do carbono fixo lá também.

A seguir é apresentado o equacionamento de Ballester e Jiménez (2005), que modela a oxidação do carbono fixo em uma camada, considerando que as reações ocorrem apenas na superfície:

$$\frac{dC}{dt} = - N \pi d_p^2 k_C \quad (5)$$

$$k_C = A_C P_{O_2,s}^n \exp\left(\frac{-E_C}{R \cdot T_p}\right) \quad (6)$$

$$N = 1/\left((1/6) \pi d_{p,0}^3 \rho_{p,0}\right) \quad (7)$$

Nas equações (5) a (7), k_C , A_C e E_C são, respectivamente, o coeficiente cinético ($\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$), o fator pré exponencial ($\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1} \text{Pa}^{-n}$) e a energia de ativação da oxidação de carbono fixo (J/mol); $P_{O_2,s}$ é a pressão parcial de oxigênio na superfície da partícula (Pa); n é a ordem de reação, considerada igual a 1 e N é o inverso da massa inicial da partícula (kg^{-1}).

2.3 Balanço de Energia

É realizado um balanço de energia na partícula para que sua temperatura, considerada homogênea, seja determinada. São consideradas no balanço proposto por Ballester e Jiménez (2005) as taxas de transferência de calor por radiação, convecção, secagem, desvolatilização e combustão do carbono fixo:

$$\rho_p \frac{1}{6} \pi d_p^3 c_p \frac{dT_p}{dt} = - Q_C + Q_V + Q_{conv} + Q_{rad} + Q_S \quad (8)$$

$$Q_V = \frac{1}{N} \frac{dV}{dt} H_V \quad (9)$$

$$Q_C = \frac{1}{N} \frac{dC}{dt} H_C \quad (10)$$

$$Q_{conv} = \pi d_p Nu k_g (T_g - T_p) \quad (11)$$

$$Q_{rad} = \pi d_p^2 \varepsilon \sigma (T_w^4 - T_p^4) \quad (12)$$

$$Q_S = - (Q_{conv} + Q_{rad}) \quad (13)$$

Nas equações (8) a (13), Q_C , Q_V e Q_S são, respectivamente, as taxas de transferência de calor pela combustão do carbono fixo, desvolatilização e secagem (W); c_p é o calor específico da partícula ($\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$); H_V e H_C são as entalpias de desvolatilização e de combustão do carbono fixo, respectivamente, (J/kg); k_g é a condutividade térmica do gás ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$); ε é a emissividade da partícula e σ é a constante

de Stefan-Boltzmann, igual a $5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$. A entalpia de desvolatilização é considerada igual a E_v (Beck e Hayhurst, 1990).

Vale ressaltar que a Eq. (13) só é válida a partir do momento em que a partícula atinge 100°C até o instante em que a mesma está completamente seca. Fora deste intervalo, $Q_s = 0$. Também é importante observar que Q_v e Q_s são processos endotérmicos, enquanto que Q_c é exotérmico. A queima de voláteis e de CO ocorre a uma certa distância da partícula e o calor liberado acaba afetando mais T_g do que T_p . Como consequência, esta taxa de transferência de calor não é considerada no balanço de energia da partícula (Smith, 1971).

A temperatura da partícula pode ser considerada uniforme por causa de seu tamanho pequeno e número de Biot menor que 0,1, o que significa que a condução térmica no interior das partículas pode ser desprezada (Stradioto, 2019).

2.4 Variação do diâmetro e da massa específica

A estrutura de uma partícula não é constante durante sua combustão, portanto é necessário que este processo também seja modelado. Segundo Jiménez e Ballester (2007), o diâmetro e a massa específica podem ser determinados a partir das equações apresentadas a seguir.

$$d_p = d_{p,0} (m_p/m_{p,0})^\alpha \quad (14)$$

$$\rho_p = \rho_{p,0} (m_p/m_{p,0})^\beta \quad (15)$$

$$3\alpha + \beta = 1 \quad (16)$$

em que m representa massa (kg); os subíndices p e 0 são referentes à partícula e ao instante de tempo inicial, respectivamente, e α e β são constantes que variam com o combustível. A maioria dos *softwares* comerciais considera que no processo de desvolatilização a partícula mantém o volume constante enquanto a massa específica diminui ($\alpha = 0$ e $\beta = 1$). Já na oxidação do carbono fixo o diâmetro diminui enquanto a massa específica se mantém constante ($\beta = 0$ e $\alpha = 1/3$).

2.5 Fragmentação

O processo de fragmentação das partículas faz com que a área de contato entre o combustível e o gás aumente, fazendo com que as taxas de reação também aumentem. A pressão dos voláteis é responsável pela criação de poucos fragmentos relativamente grandes, enquanto que o estresse térmico produz partículas pequenas em maior quantidade (Costa *et al*, 2019).

Vários modelos que determinam a probabilidade de fragmentação são encontrados na literatura (por exemplo Liu *et al*, 2000, e Senneca *et al*, 2017), porém muitos deles possuem variáveis relacionadas às propriedades do combustível que são de difícil medição. Jiménez e Ballester (2007) propõem um modelo simples de fragmentação no qual uma fração mássica, ϕ , de certa classe é transferida para outra (as classes são referentes ao tamanho das partículas, cada classe possui um diâmetro inicial diferente).

Cada partícula fragmentada gera outras duas de igual volume. Considera-se que ϕ é dependente da variação da ineficiência de combustão U , também conhecida como *unburnt*. No modelo, o processo de fragmentação é realizado a cada 0,2 segundos, aproximadamente, e ϕ é calculado como

$$\phi = \theta \cdot \Delta U \quad (17)$$

$$U = \frac{C + V}{C_0 + V_0} \quad (18)$$

sendo θ é uma constante.

O código desenvolvido neste trabalho apresenta uma variação do modelo do Ballester e Jiménez: a fração mássica fragmentada de uma classe gera uma nova classe, enquanto que os autores do modelo de referência transferem essa quantidade de massa para outra classe já existente. As vantagens do modelo proposto no presente trabalho é que a simulação representa melhor a realidade, pois quando uma quantidade de massa de uma classe é transferida para outra, é necessário que o *unburnt* e outras propriedades sejam recalculadas como uma média da mistura das duas classes. Ao se criar uma nova classe, o estado atual da partícula sempre é respeitado para o próximo passo de tempo. Em contrapartida, o custo computacional pode aumentar significativamente dependendo da quantidade de eventos de fragmentação e da quantidade de classes geradas. As Figuras 2 e 3 apresentam a evolução de várias propriedades das partículas de carvão ao longo do forno de uma simulação qualquer (apenas para fins de ilustração). É possível observar a criação de novas classes pelo processo de fragmentação pelas curvas que não começam na entrada do forno.

Figura 2: Evolução da velocidade, temperatura, diâmetro e massa específica de diversas partículas ao longo do forno.

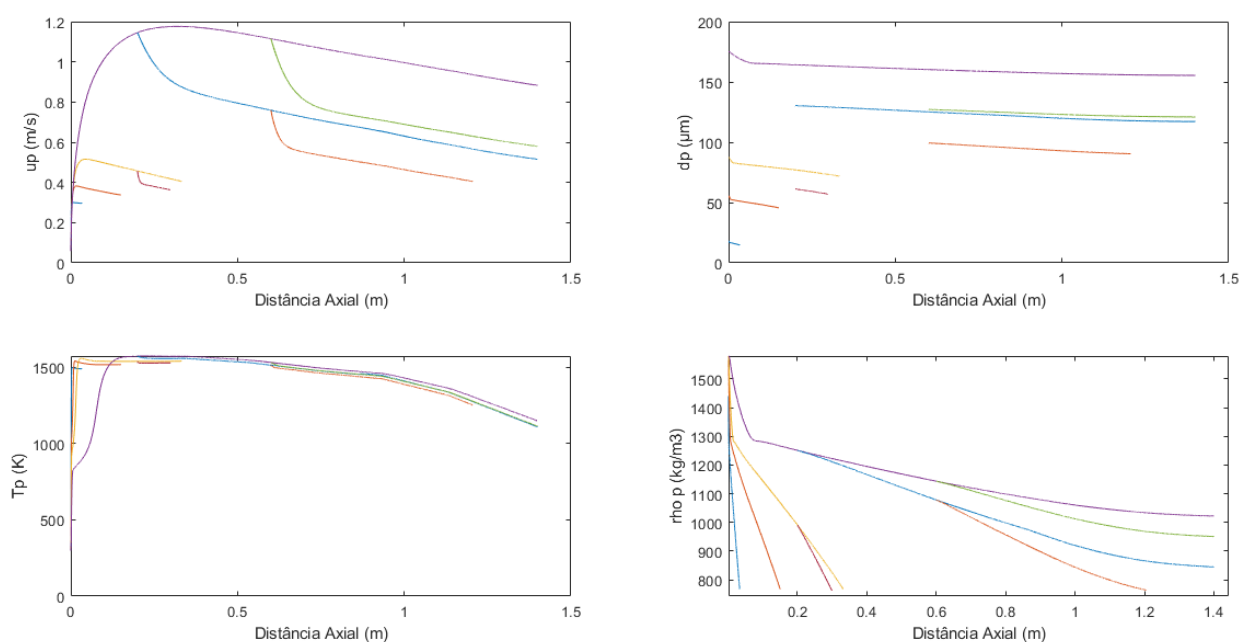
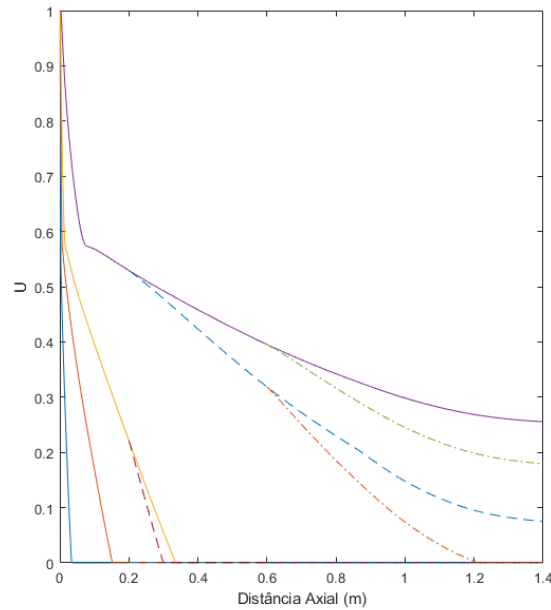


Figura 3: Evolução do *unburnt* de diversas partículas ao longo do forno.



Percebe-se nas figuras apresentadas que ao se fragmentar, uma partícula desacelera, aumentando seu tempo de residência dentro do forno e também queima de forma mais rápida, devido ao aumento da área de contato entre combustível e ar, como mencionado anteriormente.

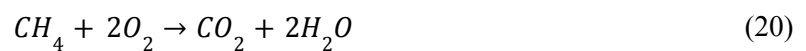
2.6 Pressão parcial e difusão de oxigênio

A quantidade de oxigênio é determinante para a taxa de combustão de carbono fixo, sendo necessário calculá-la, assim como modelar a difusão de oxigênio até a partícula. A pressão parcial de oxigênio longe da partícula em certa posição axial do forno, $P_{O_2,g}$, pode ser obtida através da Eq. (19), de Ballester e Jiménez (2005):

$$\frac{M_{O_2} G}{\rho_g RT_g} (P_{O_2,g,0} - P_{O_2,g}) = \frac{1}{v_v} (V_0 - \sum_j w_j V_j) + \frac{1}{v_c} (C_0 - \sum_j w_j C_j) \quad (19)$$

em que M_{O_2} é a massa molar de oxigênio (kg/mol); G é a razão entre vazão mássica de ar e de combustível na entrada do DTF ($G = m_{air,0}/m_{fuel,0}$); w_j é a fração mássica de cada classe j e v_v e v_c são, respectivamente, as razões estequiométricas de desvolatilização e de combustão do carbono fixo.

Considera-se que metano é o único volátil produzido e que todo carbono fixo sofre combustão completa, conforme as seguintes reações químicas.



portanto v_v e v_c são respectivamente 0,25 e 0,375.

Vale ressaltar que a combustão de carbono fixo em altas temperaturas normalmente é incompleta e tem como principal produto o CO , porém este também é oxidado em forma de gás fora da partícula formando finalmente CO_2 (Leonardo Zimmer 2012).

A massa de oxigênio é fornecida para a partícula pelo processo de difusão, o qual pode ser expresso a partir da Lei de Fick para determinar a pressão parcial de oxigênio na superfície da partícula, $P_{O_2,s}$.

$$2\pi N d_p D_{O_2} \frac{M_{O_2}}{RT_p} (P_{O_2,g} - P_{O_2,s}) = \frac{1}{v_c} \pi N d_p^2 A_c P_{O_2,s}^n \exp\left(\frac{-E_c}{R \cdot T_p}\right) \quad (22)$$

sendo D_{O_2} é a difusividade mássica do oxigênio (m^2/s), calculada aproximando-se as propriedades do gás como sendo N_2 a pressão atmosférica e a temperatura medida (Bird, Stewart e Lightfoot, 2007).

O termo da direita representa a quantidade de oxigênio consumido na oxidação do carbono fixo, portanto aqui é considerado uma razão estequiométrica v_c de 0,75, referente a reação descrita abaixo.



3 METODOLOGIA

3.1 Dados experimentais

Os experimentos no DTF fornecem alguns dos dados de entrada do código, entre eles estão: temperatura da parede do forno, perfil térmico do gás e do *burnout* ao longo do forno e taxas de alimentação de carvão e de ar. O perfil térmico do gás é obtido com o auxílio de um termopar e, portanto, deve-se fazer um balanço de energia no mesmo para calcular a temperatura do gás propriamente dita. O balanço considera as taxas de transferência de calor de radiação e de convecção. Além disso, é importante que sejam medidas algumas propriedades da amostra do combustível, como massa específica, distribuição granulométrica das partículas e análise imediata. Ainda é possível fazer uma análise da composição dos gases ao longo do forno com um analisador de gases, porém isto não é essencial para o desenvolvimento deste trabalho.

3.2 Simplificações

As simplificações adotadas no modelo estão sintetizadas a seguir:

1. Escoamento unidimensional;
2. Regime permanente;
3. Partículas esféricas;
4. Regime de Stokes (escoamento laminar);
5. Velocidade inicial das partículas igual à velocidade do gás na entrada do forno;
6. Temperatura inicial do gás e das partículas igual à ambiente.
7. Partículas com temperatura homogênea;
8. Metano é o único volátil considerado;
9. O calor gerado pela queima dos voláteis é desprezado no balanço de energia na partícula;
10. Não há difusividade de oxigênio no interior da partícula, então a oxidação do carbono fixo ocorre apenas na superfície externa;

11. A oxidação do carbono fixo produz monóxido de carbono (na superfície da partícula) e este é consumido posteriormente para a produção de dióxido de carbono;
12. Pressão atmosférica ao longo de todo forno;
13. Fluidos considerados como gases ideais;
14. Não há interações entre as partículas;

3.3 Processo de otimização dos parâmetros cinéticos

Para determinar os parâmetros cinéticos é necessário variá-los até que a diferença entre os valores de fração não queimada obtidos experimentalmente e calculado seja a menor possível (função objetivo). O processo de otimização utiliza a função *ga* do Matlab (*genetic algorithm*). Com esta função, é possível definir uma faixa para cada parâmetro cinético em que a função irá procurar os valores otimizados. A função objetivo busca minimizar o erro, expresso como

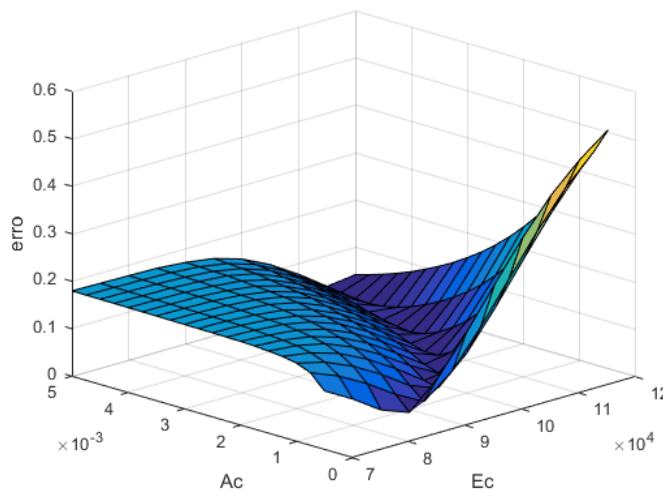
$$\delta = \sqrt{\frac{1}{j_{max} \cdot k_{max}} \sum_k \sum_j \delta_{j,k}^2} \quad (24)$$

$$\delta_{j,k} = \left\{ U(x)_{exp} - U(x)_{calc} \right\}_{j,k} \quad (25)$$

em que j e k representam o dado experimental número j do experimento número k e x a posição axial no forno.

É importante observar que como o modelo possui quatro variáveis a serem estimadas (os quatro parâmetros cinéticos, E_c , E_v , A_c e A_v), diferentes combinações dos parâmetros podem levar ao mesmo resultado final. A Figura 4 ilustra isto apresentando o erro obtido para diferentes pares de A_c e E_c . É observado uma linha de erro mínimo, ao invés de um único ponto mínimo.

Figura 4: Erro obtido com diferentes pares dos parâmetros cinéticos de combustão do carbono fixo.



3.4 Validação do código

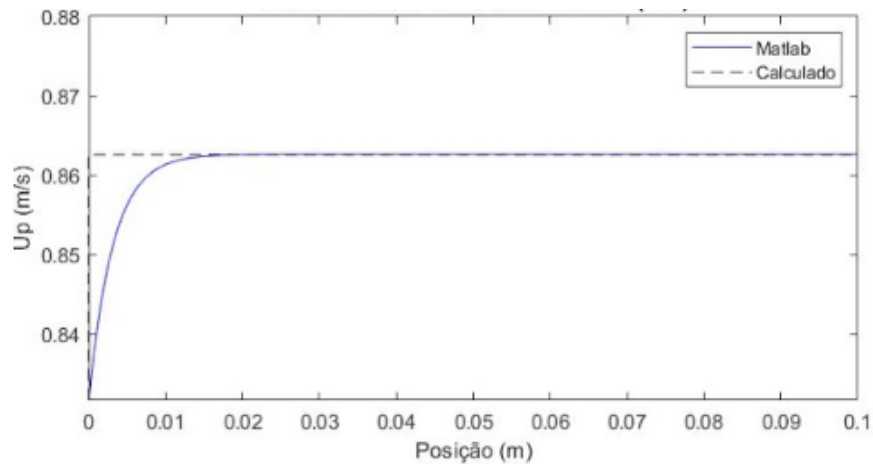
Algumas verificações são feitas de modo a validar o código.

3.4.1 Velocidade terminal

Calculou-se analiticamente a velocidade terminal de uma partícula esférica caindo dentro do DTF anulando o lado esquerdo da Eq. (1). O resultado analítico, apresentado na Eq. (26), é comparado com o do código desligando os processos de combustão para que o diâmetro e a massa específica da partícula se mantenham constantes durante sua queda. A temperatura e velocidade do gás também são consideradas constantes ao longo do forno. O resultado numérico coincide com o analítico, como pode ser visto na Figura 5.

$$u_p = \frac{d_p^2 g}{18\mu} (\rho_p - \rho_g) + u_g \quad (26)$$

Figura 5: Comparação da velocidade terminal calculada analiticamente com o perfil de velocidade obtido numericamente para uma partícula de diâmetro 30,5 μm .



3.4.2 Aquecimento das partículas

O método da capacitância global foi adotado para calcular analiticamente o aquecimento de uma partícula caindo no DTF considerando apenas a taxa de transferência de calor por convecção. As equações (27) e (28) mostram o balanço de energia e a sua solução, a qual representa a função que descreve a temperatura da partícula ao longo do tempo (Bergman, 2014).

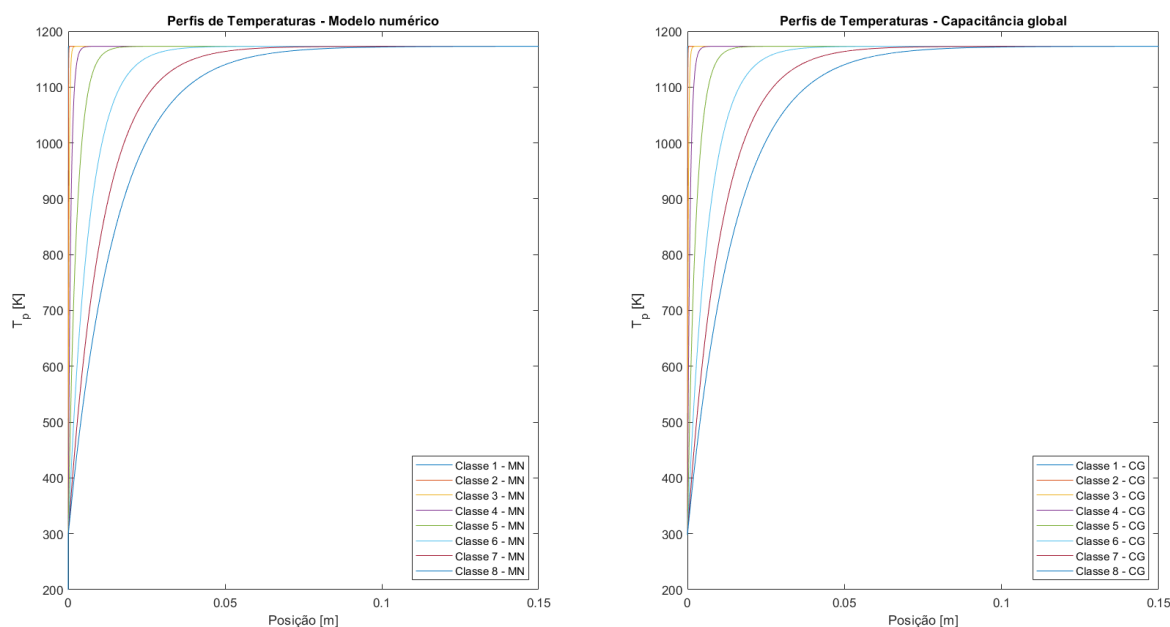
$$hA_s(T_g - T_p) = m_p c_p \frac{dT_p}{dt} \quad (27)$$

$$T_p = (T_{p,0} - T_g) \exp\left(\frac{-hA_s}{m_p c_p} \cdot t\right) + T_g \quad (28)$$

em que h é o coeficiente de transferência de calor por convecção (W/m²K); A_s é a área da superfície da partícula (m²).

O cálculo da combustão é novamente desligado no código para comparar o resultado numérico com a Eq. (28), na qual T_g é considerada constante ao longo do forno e $T_{p,0}$ igual à temperatura ambiente. O resultado obtido pelo código e pelo método da capacitância global é apresentado na Figura 6.

Figura 6: Comparação dos perfis de temperatura obtidos pelo modelo numérico e pelo método da capacitância global.

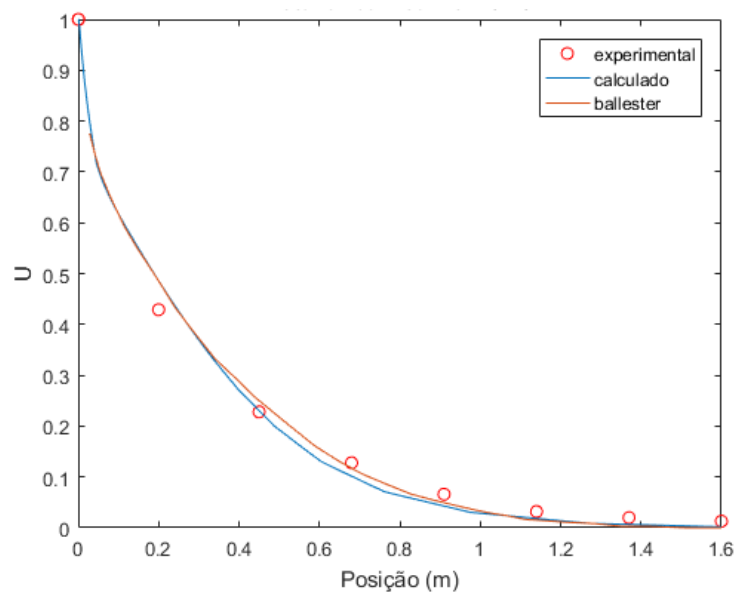


As classes de partículas menores atingem a estabilidade térmica mais rapidamente do que as maiores e o desvio entre o modelo numérico e analítico é desprezível.

3.4.3 Comparação com o trabalho de Ballester e Jiménez (2005)

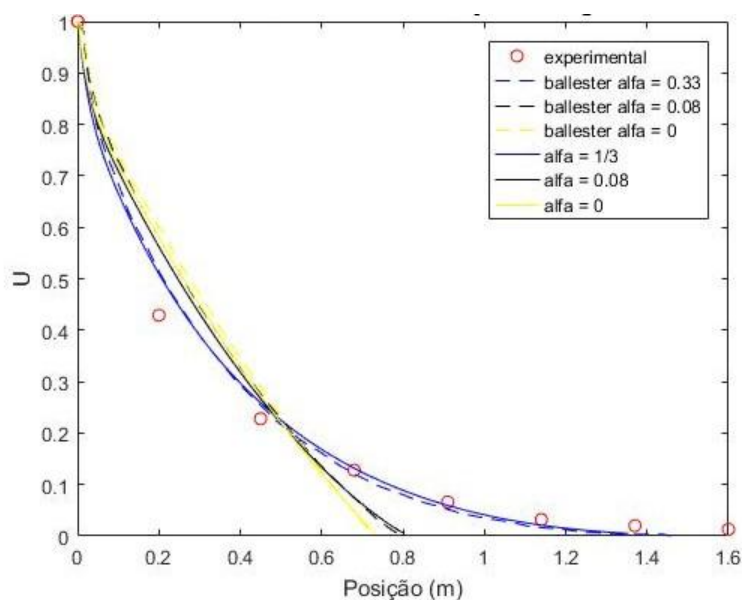
Como a modelagem implementada no código desenvolvido neste trabalho foi praticamente toda baseada na modelagem de Ballester e Jiménez (2005 e 2007), algumas de suas simulações foram reproduzidas para verificar se a implementação foi correta. Os gráficos abaixo comparam os resultados referentes ao experimento *run D* (ver o artigo do Ballester e Jiménez de 2005 para mais informações). A Figura 7 compara o valor calculado de *unburnt* total considerando várias classes de partículas. A simulação deste trabalho considerou 20 classes, enquanto que Ballester e Jiménez (2005) não informaram este número.

Figura 7 - Comparação do resultado do *unburnt* total obtido neste trabalho com o de Ballester e Jiménez (2005).



A Figura 8 apresenta a influência que o parâmetro α tem sobre o *unburnt* calculado. Considera-se que todas as partículas possuem diâmetro inicial de $52,2 \mu\text{m}$ (uma classe apenas).

Figura 8: Comparação do resultado de *unburnt* de uma classe obtido neste trabalho com o de Ballester e Jiménez (2005).



Observa-se que os resultados são muito próximos em ambas as figuras. É interessante notar que quando se considera apenas um único tamanho característico para representar toda a amostra de partículas, como na Figura 8, o valor de α que aparentemente leva a menor discrepância entre os valores calculados e os experimentais é $1/3$, porém, segundo Ballester e Jiménez (2005), este valor não descreve

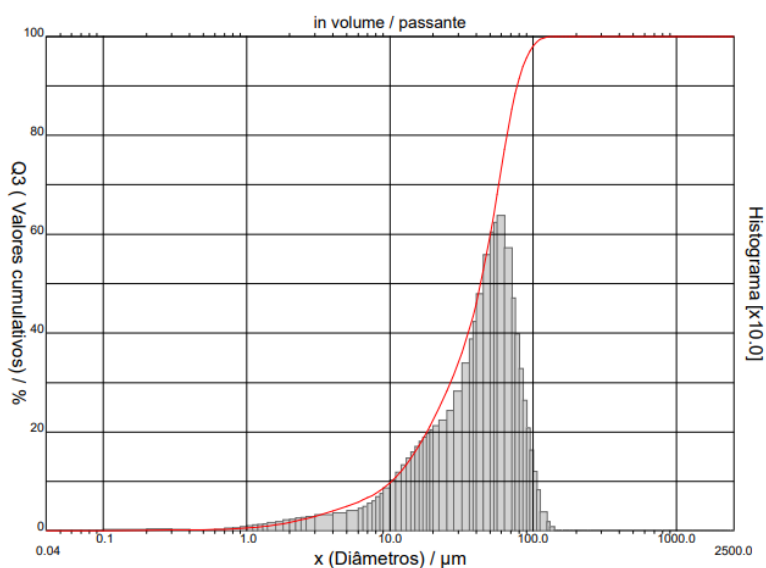
bem a variação do diâmetro das partículas. Na verdade, o valor que melhor representa esse fenômeno para o carvão estudado é 0,08 (valor utilizado na simulação da Figura 7). Com isso, pode ser concluído que desprezar a distribuição granulométrica da amostra de combustível produz resultados que não representam os experimentos realizados.

Considera-se que o código desenvolvido produz resultados coerentes, devido às verificações realizadas com expressões analíticas e às comparações com outros modelos numéricos da literatura.

3.5 Aplicação do modelo em um carvão betuminoso

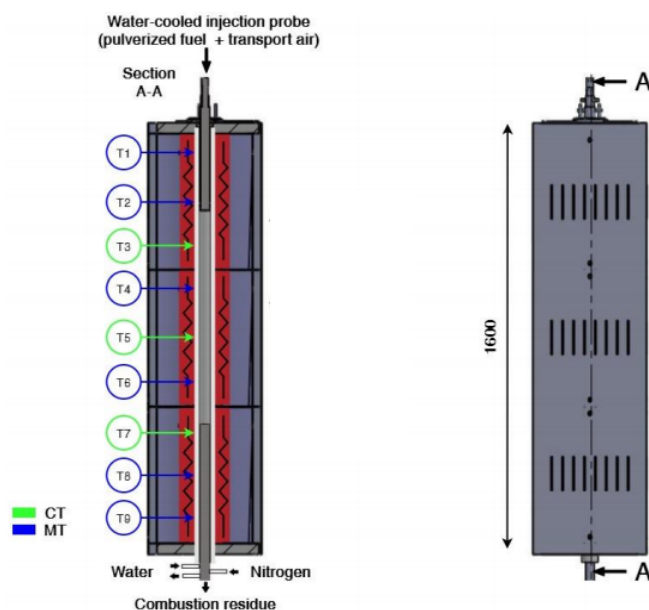
O modelo é aplicado em um carvão colombiano classificado como betuminoso alto volátil, cuja massa específica é de 1350 kg/m^3 e análise imediata apresenta valores de carbono fixo, voláteis e cinzas, respectivamente de 52,3, 40,3 e 7,4% (valores em base seca). Em base úmida a amostra possui 4,1% de umidade. A distribuição granulométrica é analisada com um difratômetro a laser Cilas 1190 *Particle Size Analyser*. Além da distribuição inicial mostrada na Figura 9, também são coletadas amostras de carvão em diferentes pontos do DTF para avaliar a evolução da distribuição e ter dados experimentais para o estudo de fragmentação das partículas.

Figura 9: Distribuição granulométrica do carvão colombiano.



Os experimentos são realizados no DTF do Laboratório de Combustão da UFRGS, mostrado na Figura 10. Ele possui 1,6 m de comprimento e três fornos tubulares internos, cada um com três termopares para controle e monitoramento da temperatura. Os testes são feitos em três temperaturas: 900, 1000 e 1100°C. O carvão é injetado através de um injetor com resfriamento a água posicionado no topo do DTF com uma taxa de 55 g/h. O ar entra pelo mesmo local com uma vazão volumétrica de 22 L/min, o que significa que há excesso de ar nos experimentos. São feitos no mínimo três testes para cada condição de temperatura para garantir melhor precisão dos resultados.

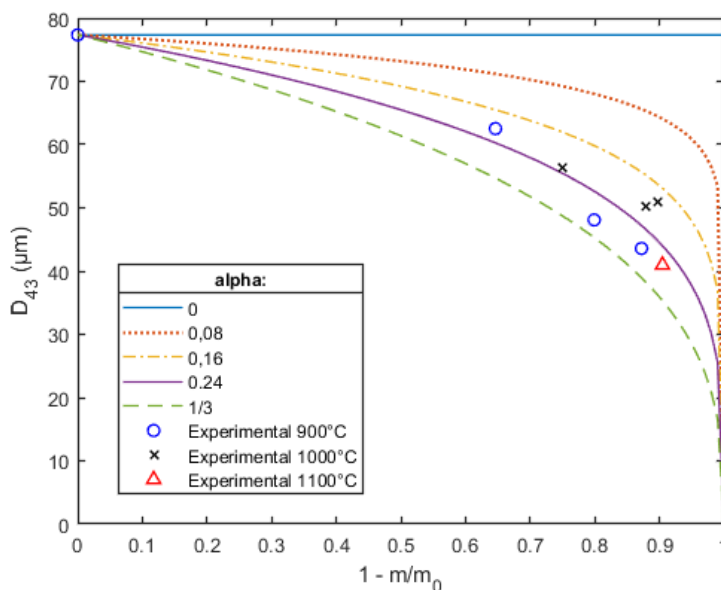
Figura 10: DTF utilizado nos experimentos. Legenda: CT = termopares de controle; MT = termopares de monitoramento.



4 RESULTADOS

A distribuição granulométrica e os *burnouts* das amostras do carvão colombiano são comparados com os resultados obtidos numericamente. Os diâmetros D_{43} experimentais são comparados com as curvas produzidas com a Eq. (14) com diferentes valores de α (Figura 11) para definir a escolha do valor deste parâmetro a ser utilizado nas simulações. Definiu-se $\alpha = 0,24$.

Figura 11: Comparação entre os valores de D_{43} experimentais e os resultados obtidos através da Eq. (14), com diferentes valores de α



Para estudar o efeito da fragmentação nas curvas de *burnout* e na evolução da distribuição granulométrica, é necessário simular o problema desconsiderando este efeito para comparação. A Tabela 1 apresenta os parâmetros cinéticos otimizados para ambos os casos (com e sem fragmentação) e o desvio entre os *burnouts* experimentais e calculados. O processo de otimização é utilizado para ajustar a curva de *burnout* desconsiderando a fragmentação primeiro. Depois, A_c passa pelo mesmo processo de otimização considerando fragmentação enquanto os outros parâmetros são mantidos constantes. Isto é feito para que a diferença dos parâmetros cinéticos seja melhor mensurada. θ é assumido igual a 1,2 por ajustar melhor os dados de D_{43} . Para fins de comparação, Jiménez e Ballester (2007) consideraram $\theta = 1,7$.

Tabela 1. Efeito da fragmentação nos parâmetros cinéticos otimizados.

	Sem fragmentação	Com fragmentação
A_c ($\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1} \text{Pa}^{-1}$)	$1,65 \times 10^{-4}$	$1,48 \times 10^{-4}$
E_c (kJ/mol)	44,0	44,0
A_v (s^{-1})	$3,04 \times 10^{-6}$	$3,04 \times 10^{-6}$
E_v (kJ/mol)	65,5	65,5
Desvio (%)	1,66	1,66

A Figura 12 apresenta as curvas de *burnout* para as três temperaturas do forno e a Figura 13 a comparação entre os resultados de *unburnt* dependendo se o processo de fragmentação é considerado ou não.

Figura 12: Comparação entre os valores de *unburnt* calculado e experimental para os três experimentos, desconsiderando fragmentação.

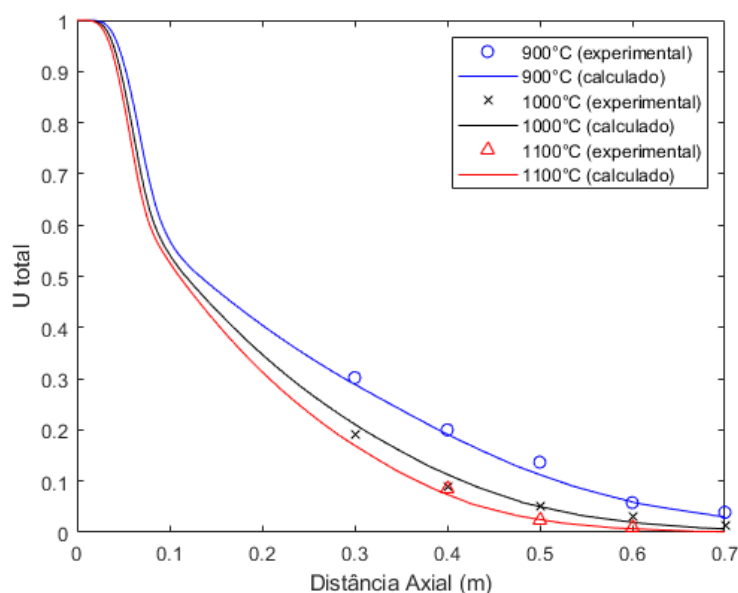
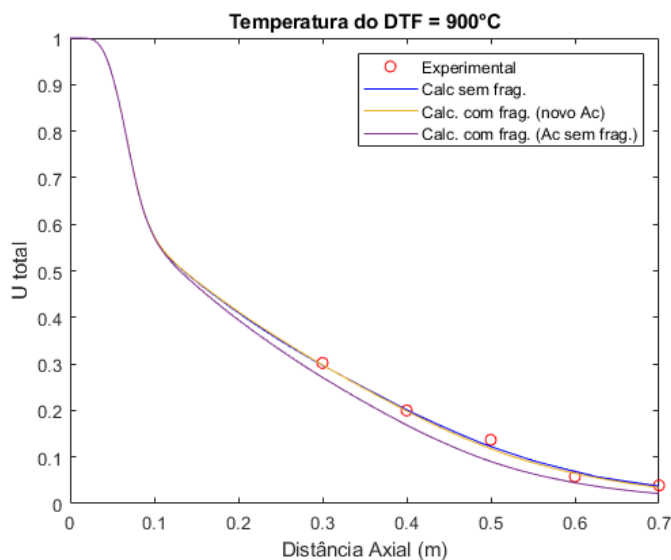


Figura 13: Comparação entre os valores de *unburnt* experimental e calculado desconsiderando a fragmentação (linha azul), considerando fragmentação (linha amarela) e considerando fragmentação com aplicação dos mesmos parâmetros cinéticos da linha azul (linha roxa).



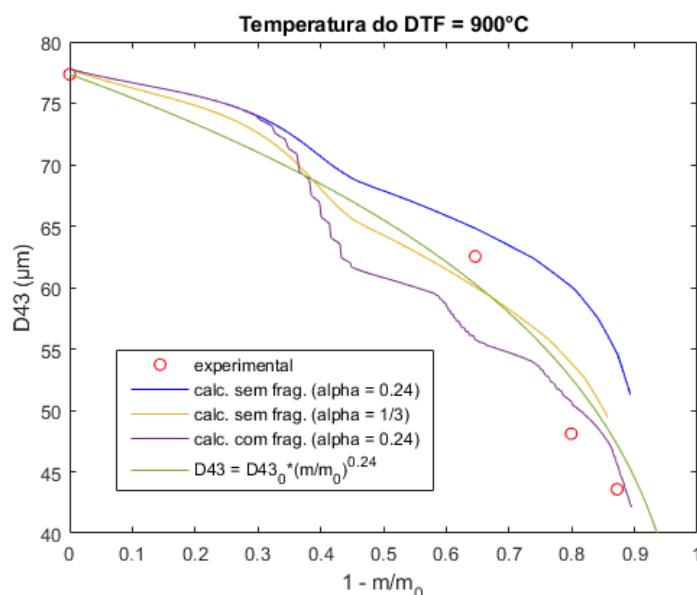
Observa-se que a curva de *unburnt* é bem ajustada aos dados experimentais sem fragmentação, com um desvio, calculado com a Eq. (24), de 1,66%. Estas curvas praticamente não se alteram ao implementar o processo de fragmentação no modelo. Diferentemente do resultado obtido neste trabalho, Jiménez e Ballester (2007) conseguiram ajustar com um desvio menor os dados experimentais com o novo modelo. Com relação à variação no A_c ao considerar a fragmentação, os autores do artigo de referência obtiveram uma redução de 28,6%, enquanto que para o carvão colombiano em análise, esta redução foi de 10,3%. Vale lembrar também que se o código for utilizado para determinar os parâmetros

cinéticos que serão utilizados em simulações CFD, o ideal é que o modelo de combustão seja o mesmo em ambos códigos, pois, como observado pelo processo de fragmentação, os parâmetros são sensíveis ao modelo adotado.

Apesar de ser possível prever o *unburnt* ao longo do forno desconsiderando a fragmentação das partículas, a evolução da distribuição granulométrica apenas tem resultados similares com os observados experimentalmente quando o fenômeno foi implementado no modelo. A evolução do D43 para ambos os casos é mostrado na Figura 14, assim como a curva da Eq. (14) com $\alpha = 0,24$. Cada degrau na curva roxa (com fragmentação) representa um evento de fragmentação em alguma classe de partículas. Estes eventos ocorrem a cada 0,2 s na simulação. Intervalos de 0,1 e 0,05 s foram testados e não produzem diferenças significativas no resultado final.

Os resultados com relação à distribuição granulométrica serão apresentados apenas para a temperatura de 900°C, pois considera-se que os dados experimentais condizem melhor com o esperado e porque os resultados das outras temperaturas não possibilitam o inferimento de mais conclusões.

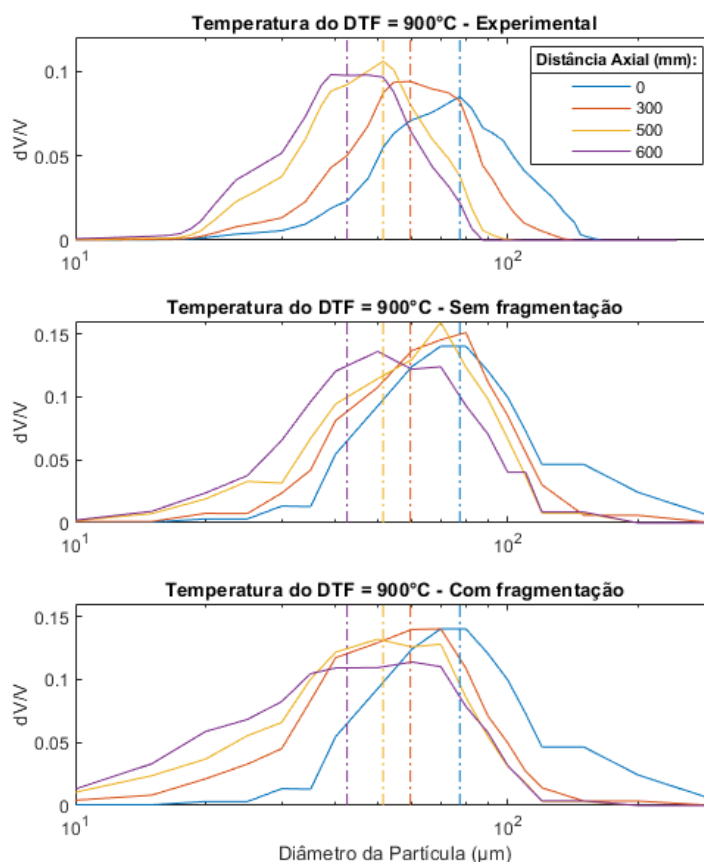
Figura 14: Evolução do D43 com e sem fragmentação em comparação com valores experimentais.



É interessante observar que a curva em azul (sem fragmentação) não é semelhante à verde (Eq. (14) com $\alpha = 0,24$) já que a primeira possui influência de todas as classes. Diferentemente do observado nas curvas de *unburnt*, a Figura 14 mostra um melhor ajuste aos dados experimentais quando o processo de fragmentação é levado em consideração. Simulações desconsiderando a fragmentação com $\alpha = 1/3$ também foram feitas e mesmo este sendo o valor que permite a maior variação de diâmetro, não foi possível prever os pontos finais como as simulações que consideraram o fenômeno.

A Figura 15 compara a distribuição granulométrica em diferentes pontos do DTF entre os dados experimentais e as simulações com e sem o modelo de fragmentação das partículas. O eixo Y (dV/V) representa a fração do volume contida em determinada faixa de diâmetro. As linhas tracejadas estão sobre os pontos máximos das curvas obtidas com dados experimentais e ajudam a comparar com os outros dois gráficos, os quais são calculados a partir de simulação numérica.

Figura 15: Evolução da distribuição granulométrica. Comparação entre dados experimentais e calculados numericamente.



Foi necessário fazer uma média móvel nos gráficos para suavizá-los e retirar ruídos causados pela discretização das partículas em classes. Apesar disto, esses resultados ainda são úteis para comparação qualitativa do formato das curvas e dos locais dos pontos máximos. É possível observar que quando a fragmentação não é considerada (segundo gráfico), os pontos máximos na entrada, em 300 e 500 mm do DTF são muito próximos, o que não é observado nem nos dados experimentais nem nos cálculos quando a fragmentação é considerada. Percebe-se também um deslocamento maior das curvas para a esquerda quando a fragmentação é considerada, o que concorda qualitativamente com os dados experimentais.

Também foi feita uma análise do efeito da secagem nos resultados de *burnout* e nos parâmetros cinéticos calculados. A abordagem é praticamente a mesma da análise do efeito da fragmentação. A diferença é que para as simulações que consideram secagem instantânea, a massa de umidade presente nas partículas é adicionada na taxa de alimentação de ar e retirada da taxa de alimentação de combustível, enquanto que as simulações que consideram o processo de secagem consideram exatamente as taxas de alimentação observadas nos experimentos, com a análise imediata do carvão em base úmida.

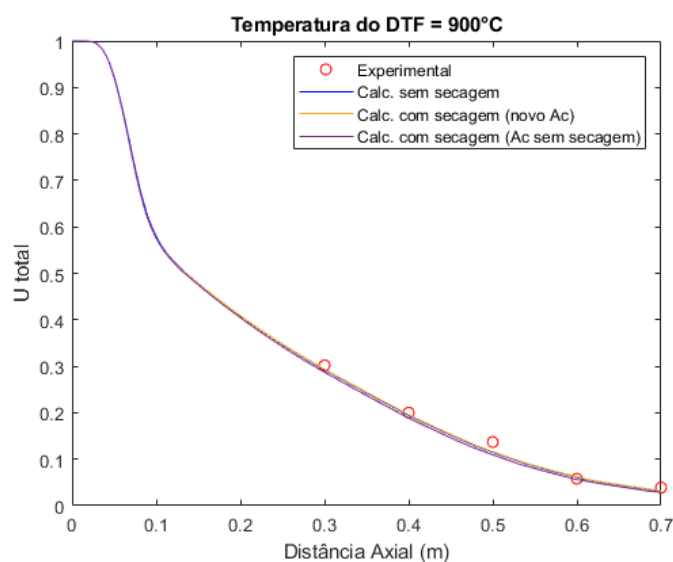
A Tabela 2 apresenta os parâmetros cinéticos otimizados quando o modelo considera a secagem e quando desconsidera, assim como o desvio com relação ao *unburnt* experimental. O mesmo procedimento de deixar E_c , A_v e E_v fixos e comparar apenas a variação de A_c no processo de otimização foi adotado.

Tabela 2. Efeito da secagem nos parâmetros cinéticos otimizados.

	Sem secagem	Com secagem
Ac (kg m⁻² s⁻¹ Pa⁻¹)	1,64 x 10 ⁻⁴	1,60 x 10 ⁻⁴
Ec (kJ/mol)	44,0	44,0
Av (s⁻¹)	3,04 x 10 ⁻⁶	3,04 x 10 ⁻⁶
Ev (kJ/mol)	65,5	65,5
Desvio (%)	1,39	1,39

O A_c teve uma diminuição de apenas 2,44% e o desvio permaneceu o mesmo, então pode-se concluir que, para o carvão e experimentos analisados neste trabalho, tanto o efeito de fragmentação quanto o de secagem não interferem na capacidade do modelo ajustar a curva de *unburnt* calculada com os dados experimentais, ou seja, a implementação desses processos não altera o formato da curva de *unburnt* otimizada, como também pode ser visualizado na Figura 16, a qual apresenta as curvas de *unburnt* dependendo se o processo de secagem é considerado ou não.

Figura 16: Comparação entre o *unburnt* experimental e calculado quando se desconsidera a secagem (linha azul), quando se considera a secagem (linha amarela) e quando se considera a secagem com aplicação dos mesmos parâmetros cinéticos da linha azul (linha roxa).



A partir da Figura 16, é possível concluir que a hipótese de secagem instantânea é uma boa aproximação e pode ser utilizada para simplificação do modelo.

5 CONCLUSÃO

O estudo realizado apresenta a modelagem matemática utilizada para simular a combustão de combustível sólido em um DTF, discutindo suas simplificações e comparando-a com outros modelos da literatura. Para fins de validação do código criado no Matlab[®], comparou-se alguns resultados com os resultados analíticos da velocidade terminal das partículas e de suas temperaturas, com o modelo da capacitância global, além de comparar com os resultados numéricos do modelo de referência. Os resultados foram muito satisfatórios, comprovando que o código está adquirindo resultados coerentes com o esperado.

O principal motivo do código é, além de estudar os fenômenos físicos e químicos envolvidos na combustão de carvão ou biomassa pulverizados, calcular os parâmetros cinéticos com um processo de otimização, onde se minimiza a diferença entre o *unburnt* calculado e o obtido experimentalmente. Um carvão colombiano foi utilizado para este fim. Os resultados da fração de *unburnt* obtidos numericamente se aproximam dos pontos experimentais com um erro menor que 2%.

Também é realizado um estudo do efeito dos processos de fragmentação e de secagem nos parâmetros cinéticos calculados, assim como nas curvas de *unburnt* e na evolução da distribuição granulométrica (no caso da fragmentação). Observa-se que a secagem não possui muita importância, pois a umidade presente no carvão estudado é baixa, podendo ser desprezada e o modelo considerar secagem instantânea. No caso da fragmentação, existe uma diferença significativa nos resultados dos parâmetros cinéticos, curva de *unburnt* e principalmente na evolução da distribuição granulométrica, sendo que quando a fragmentação não é considerada, não é possível reproduzir os dados experimentais de distribuição granulométrica satisfatoriamente.

De forma geral, o código desenvolvido neste trabalho é capaz de simular a combustão de combustíveis sólidos em um DTF, calcular seus parâmetros cinéticos e realizar estudos sobre os efeitos dos diferentes fenômenos e seus respectivos modelos matemáticos nos resultados numéricos. Assim, demonstra ser uma ferramenta valiosa para estudos de otimização de operação de usinas termelétricas que utilizem CFD.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AGÊNCIA INTERNACIONAL DE ENERGIA. **Fuel and Technologies**. Disponível em <<https://www.iea.org/fuels-and-technologies/coal>> Acesso em: abr. 2022
- SILVA, C.V et al. CFD Analysis Of The Coal Combustion In A Boiler Of Thermal Power Plant Using Diferents Kinds Of The Manufactured Coals. In: 13th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering, December 05-10, 2010, Uberlandia, MG, Brazil.
- NASER, J; AL-ABBAS, A; DODDS, D. CFD modeling of air-fired and oxy-fuel combustion of lignite in a 100 KW furnace. **Fuel** Vol 90 (2011) pp. 1778-1795.
- NASER, J; BHUIYAN, A. CFD modelling of co-firing of biomass with coal under oxy-fuel combustion in a large scale power plant. **Fuel** Vol. 159 (2015) pp. 150-168.
- AMELL, A; GARCÍA, A; RENDON, M. Combustion model evaluation in a CFD simulation of a radiant-tube burner. **Fuel** Vol. 276 (2020) 118013
- ZIMMER, L. **Modelagem da Combustão de Carvão em um Forno de Queda Livre**. 2012. Dissertação - (Mestrado em Engenharia). Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2012.
- BALLESTER, J; JIMÉNEZ, S. Kinetic parameters for the oxidation of pulverised coal as measured from drop tube tests. **Combustion and Flame** Vol. 142 (2005) pp. 210-222.
- JIMÉNEZ, S; BALLESTER, J. Study of the evolution of particle size distributions and its effect on the oxidation of pulverized coal. **Combustion and Flame** Vol. 151 (2007) pp. 482-494.
- STRADIOTO, D. **Proposição de um Metamodelo para a Representação do Processo de Combustão de Carvão em um Tubo de Queda Livre Baseado em Análise Numérica**. 2019. Tese - (Doutorado em Engenharia). Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2019.
- BERGMAN, T.L et al. **Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa**. LTC, Brasil, 7^a edição, 2014.
- WANG, G. **(Co-)combustion of solid fuels: experiments and modeling**. 2014. Tese - (PhD Degree in Mechanical Engineering). Universidade de Lisboa, Instituto Superior Técnico, 2014.
- BECK, N.C; HAYHURST, A.N. The Early Stages of the Combustion of Pulverized Coal at High Temperatures I: The Kinetics of Devolatilization. **Combustion and Flame** Vol. 79 (1990) pp. 47-74.
- SMITH, I.W. Kinetics of Combustion of Size-Graded Pulverized Fuels in the Temperature Range 1200-2270°K. **Combustion and Flame** Vol. 17 (1971) pp. 303-314.
- COSTA, M. Direct observations of single particle fragmentation in the early stages of combustion under dry and wet conventional and oxy-fuel conditions. **Proceedings of the Combustion Institute** Vol. 37 (2019) pp. 3005-3012.
- LIU, G et al. Modeling the fragmentation of non-uniform porous char particles during pulverized coal combustion. **Fuel** Vol. 79 (2000) pp. 627-633.
- SENNECA, O et al. Prediction of structure evolution and fragmentation phenomena during combustion of coal: Effects of heating rate. **Fuel Processing Technology** Vol. 166 (2017) pp. 228-236.

BIRD, R.B; STEWART, W.E; LIGHTFOOT, E.N. **Transport Phenomena**, 2ª edição, 2007.