

PREDICCIÓN DE LA DESVOLATILIZACIÓN DE CARBONES PULVERIZADOS

PULVERIZED COAL DEVOLATILISATION PREDICTION

ANDRÉS F. ROJAS

Departamento de Ingeniería, Universidad Nacional de Colombia, Sede Palmira, afrojasgo@unal.edu.co

JUAN M. BARRAZA

Escuela de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad del Valle, Cali, jubarraz@univalle.edu.co

Recibido para revisar Marzo 03 de 2007, aceptado Noviembre 30 de 2007, versión final Diciembre 18 de 2007

RESUMEN: El propósito de este estudio fue predecir la desvolatilización de dos carbones bituminosos a bajas velocidades de calentamiento (50°C/min), con el programa FG-DVC (“Functional Group-Depolimerization, Vaporisation and Crosslinking”), y comparar los perfiles de desvolatilización predichos por el programa con los obtenidos en un Analizador Termogravimétrico. También se estudió la liberación de volátiles a alta velocidad de calentamiento (10⁴K/s) en un Reactor Tubular de Caída. Se obtuvieron los perfiles de velocidad de formación del alquitrán, metano, monóxido de carbono y gas carbónico; y, la distribución elemental de hidrógeno, oxígeno, nitrógeno y azufre, en los productos de la desvolatilización, por medio del programa FG-DVC a bajas velocidades de calentamiento; y se calcularon los volátiles liberados y el factor R, a altas velocidades de calentamiento. Se encontró que el programa predice la desvolatilización de carbones bituminosos a baja velocidad de calentamiento. A altas velocidades de calentamiento se obtuvo liberación de volátiles del 30%.

PALABRAS CLAVE: Carbonizado, desvolatilización, carbón pulverizado, reactor tubular, programa FG-DVC.

ABSTRACT: The aim of this study was to predict the two bituminous coals devolatilisation at low rate of heating (50°C/min), with program FG-DVC (“Functional Group-Depolimerization, Vaporisation and Crosslinking”), and to compare the devolatilisation profiles predicted by program FG-DVC, which are obtained in the Thermogravimetric Analyzer. It was also study the volatile liberation at (10⁴ K/s) in a Drop-Tube Furnace. The tar, methane, carbon monoxide, and carbon dioxide, formation rate profiles, and the hydrogen, oxygen, nitrogen and sulphu, elemental distribution in the devolatilisation products by FG-DVC program at low rate of heating was obtained; and the liberation volatile and R factor at high rate of heating was calculated. It was found that the program predicts the bituminous coals devolatilisation at low rate heating. At high rate heating, a volatile liberation around 30% was obtained.

KEY WORDS: Char, devolatilisation, pulverized coal, drop-tube furnace, FG-DVC program.

1. INTRODUCCIÓN

El modelo global de combustión de carbón pulverizado está constituido por una serie de reacciones químicas, que involucran la desvolatilización del carbón, combustión de volátiles, combustión del carbonizado y emisión de especies contaminantes.

Esto indica que el modelo global de combustión se puede determinar por medio de submodelos para cada una de las reacciones químicas anteriormente mencionadas.

Los submodelos de desvolatilización de carbón más utilizados y reconocidos en la literatura son: el submodelo empírico de una etapa [1, 2], que es el modelo matemático más antiguo, donde se

considera que la velocidad de reacción global es de primer orden y que la velocidad de liberación de volátiles es proporcional al contenido de materia volátil remanente en una partícula de carbón; el submodelo de dos etapas [2-4] que describe la reacción de desvolatilización por solo un par de reacciones paralelas e irreversibles de primer orden y considera que una de las reacciones tiene mayor energía de activación que la otra, indicando que se activa en un rango de temperatura mayor; el submodelo de Distribución de Energías de Activación, DEA, [2, 5] que considera que la desvolatilización ocurre por una serie infinita de reacciones paralelas e irreversibles de primer orden, de tal manera que las energías de activación de cada reacción se agrupan para dar una distribución Gaussiana continua de energías de activación, este submodelo permite evaluar los efectos de la presión, tamaño de partícula y el historial de temperatura sobre el comportamiento de la desvolatilización; y el submodelo de red que describe al carbón como una red o cadenas de núcleos aromáticos conectados entre sí por puentes alifáticos, de tal manera que refleja la naturaleza química del comportamiento de la pirólisis, estudiando el comportamiento de liberación de cada especie volátil considerando que esta liberación depende de la composición química y de la estructura molecular del carbón, esto quiere decir que las velocidades de disociación de las unidades aromáticas, la eliminación de grupos funcionales periféricos, la formación de carbonizado y otras etapas de reacción son estadísticamente determinados sobre la base de una estructura molecular específica.

En la actualidad hay tres tipos de códigos o modelos estadísticos empleados en el submodelo de red para modelar la desvolatilización del carbón, los cuales son: el modelo Entrecruzamiento, Vaporización y Despolimerización por Grupos Funcionales (Functional-Group, Depolymerization, Vaporization, Cross-linking, FG-DVC) [6, 7]; modelo FLASHCHAIN [8,9]; y el modelo de Desvolatilización Química por Percolación (Chemical Percolation Devolatilization, CPD) [10]. Estos modelos han reflejado exitosamente las características químicas de los carbones sobre el comportamiento en la combustión y pueden

aplicarse para varias condiciones de quemado (temperatura, velocidad de calentamiento, presión). Aunque estos modelos necesitan muchas más etapas de cálculo comparado con los modelos de reacción de primer orden, el modelo FG-DVC es el más sencillo de todos, necesitando como información inicial solamente el análisis elemental del carbón.

El programa FG-DVC modela los fenómenos que ocurren durante la desvolatilización y evalúa la influencia de la velocidad de calentamiento en la emisión de compuestos volátiles. Este modelo se basa en que la composición y densidad de grupos funcionales de un carbón es función de su análisis elemental, de tal manera que conociendo esta composición elemental se puede predecir, por interpolación entre los datos de carbones de una base de datos que tiene el programa, toda la información necesaria sobre los grupos funcionales presentes y sobre parámetros cinéticos y estructurales del carbón; además, predice la distribución de volátiles, carbonizado y alquitrán, la emisión de distintos compuestos gaseosos (CO, CO₂, CH₄, olefinas, H₂, HCN, NH₃); la distribución de pesos moleculares del alquitrán, así como la fluidez del carbón. Esto quiere decir, que este programa no tiene en cuenta factores fluidodinámicos, ni de diseño del reactor, sino que simula simplemente la química del proceso de desvolatilización. El modelo FG describe la evolución del gas y la composición elemental y los grupos funcionales del alquitrán y del carbonizado; mientras que el modelo DVC predice la producción y distribución del peso molecular del carbonizado y del alquitrán. La cinética de descomposición de cada tipo de grupo funcional se describe por una expresión de velocidad de reacción de primer orden con una distribución de energía de activación [11].

El programa FG-DVC consta de tres carpetas (COALS, INPUT y FGDVC) donde están los datos de composición de grupos funcionales, datos cinéticos y datos de la estructura carbonosa de 11 carbones totalmente caracterizados. En las carpetas nombradas como COALS e INPUT esta la base de datos de los 11 carbones; mientras que en la carpeta FGDVC se encuentra el ejecutable del programa junto con un archivo llamado INSTRUCT donde se debe especificar las condiciones de operación del proceso de desvolatilización que se quiere simular (presión,

temperatura final de reacción, tiempo de residencia y velocidad de calentamiento). Estas condiciones van a ser determinantes en la cantidad de materia volátil, carbonizado y alquitranes que se generarán durante la desvolatilización. Introducida la anterior información, se ejecuta el archivo llamado FGDVCD.EXE, donde se introduce el análisis elemental del carbón en estudio en términos de porcentaje en base seca. Posterior a la ejecución del programa se obtiene como resultado dos archivos: OUTPUT y GASRAT. El archivo OUTPUT contiene el análisis elemental o distribución porcentual de los elementos C, H, N, O y S, en base seca libre de materia mineral, en el carbonizado, en el gas y en el alquitrán. El archivo GASRAT presenta la información de los perfiles de velocidad de formación del alquitrán y de especies gaseosas como: CH₄, CO y CO₂, entre otros; a igual que el perfil de pérdida de peso del carbón durante la desvolatilización.

El objetivo de este trabajo es comparar los perfiles de quemado obtenidos experimentalmente (TGA) con los obtenidos en forma teórica mediante el modelo de desvolatilización FG-DVC; y predecir la evolución de volátiles, carbonizado y alquitrán, al igual que las emisiones de distintos compuestos gaseosos; de igual manera se determinó la cantidad de volátiles liberados y la capacidad que tiene cada carbón en liberar volátiles a altas velocidades de calentamiento en un reactor tubular de caída.

2. PARTE EXPERIMENTAL

2.1 Selección, Preparación y Análisis de los Carbones

Para este estudio se seleccionaron dos carbones bituminosos, uno procedente de la mina La Yolanda (Colombia) y el otro de la mina Thoresby (Reino Unido), los cuales se caracterizaron respecto a su análisis próximo y elemental. Tanto para estos análisis como para la desvolatilización en el analizador termogravimétrico (TGA) y en el reactor de caída, las muestras se redujeron de tamaño en un

molino de bolas y se clasificaron a tamaños menores de 75 μm .

2.2 Análisis Termogravimétrico

Se obtuvieron las curvas de pérdida de peso durante la desvolatilización dinámica de los dos carbones por medio de un analizador termogravimétrico de marca Pyris 1 TGA Perkin Elmer. Para el análisis termogravimétrico se utilizó un peso de la muestra de 10 ± 0.5 mg, un diámetro de partícula inferior a 75 μm , una velocidad de calentamiento de 50 °C/min., un flujo de nitrógeno de 30 cm³/min. La desvolatilización se realizó entre 30 y 900°C.

2.3 Desvolatilización en un Reactor Tubular de Caída

El sistema de desvolatilización es un sistema que trabaja en continuo, donde se alimenta nitrógeno y carbón en una misma corriente, buscando que los tiempos de desvolatilización del carbón en la zona isotérmica del horno sean del orden de milisegundos. Un esquema del sistema de desvolatilización del carbón se muestra en la Figura 1. Los carbones fueron desvolatilizados a tres tiempos (100, 150 y 300 ms) y a tres temperaturas (900, 1000 y 1100), con velocidades de calentamiento del orden de 10⁴ K/s.

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

3.1 Caracterización de los Carbones

En la Tabla 1 se presenta el análisis próximo en base seca de los carbones, al igual que la relación combustible CF/MV, el poder calorífico y el rango del carbón dado por la reflectancia aleatoria de la vitrinita. Como se puede observar el carbón de la mina Thoresby tiene el mayor contenido de ceniza y el menor contenido de materia volátil. La relación combustible CF/MV es mayor en el carbón La Yolanda, indicando que es el carbón de menor reactividad de los dos. También se observa que el carbón La Yolanda presenta el mayor poder calorífico.

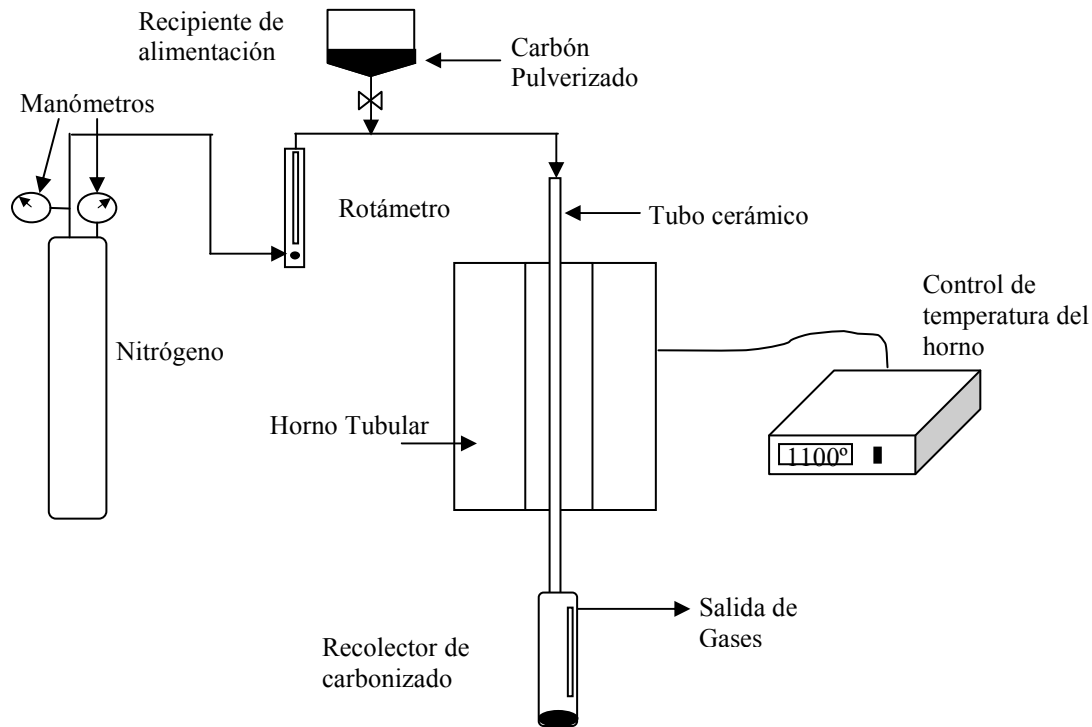


Figura 1. Esquema del sistema de desvolatilización.

Figure 1. Devolatilisation system schema.

Este último resultado está relacionado con el contenido de ceniza. Usualmente, carbones con alto contenido de ceniza presentan bajo poder calorífico. Los dos carbones son de rango medio clasificados como bituminosos alto en volátiles,

con la diferencia que el carbón de la mina Thoresby es de clase B y el carbón La Yolanda es de clase A; esto indica que el carbón La Yolanda es el de mayor rango de los dos carbones analizados.

Tabla 1. Análisis próximo de los carbones

Table 1. Coal proximate analysis

| Carbón | Humedad % | % base seca | | | Relación CF/MV | Poder cal. BTU/Lb | Reflect. aleatoria de la vitrinita VRo |
|------------|-----------|-------------|-------|-------|----------------|-------------------|--|
| | | MV | CF | Cz | | | |
| La Yolanda | 0.98 | 28.82 | 55.57 | 15.61 | 1.93 | 12809 | 0.98 |
| Thoresby | 3.15 | 26.69 | 50.56 | 22.75 | 1.89 | 10476 | 0.70 |

Tabla 2. Análisis elemental de los carbones

Table 2. Coal elemental analysis

| Carbón | %C | %H | %N | %S | %O ^a | H/C | O/C |
|------------|-------|------|------|------|-----------------|------|------|
| La Yolanda | 85.41 | 5.58 | 1.32 | 1.38 | 6.31 | 0.78 | 0.06 |
| Thoresby | 79.50 | 5.73 | 1.39 | 2.21 | 11.17 | 0.87 | 0.11 |

^a el oxígeno es determinado por diferencia.

En la Tabla 2 se muestra el análisis elemental y las relaciones atómicas H/C y O/C, en base seca libre de ceniza, de los carbones. El mayor contenido de carbono lo reporta La Yolanda, mientras que el carbón Thoresby presenta el mayor contenido de azufre y de oxígeno. Los dos carbones presentan aproximadamente el mismo contenido de hidrógeno y nitrógeno. Thoresby tiene los mayores valores de las relaciones H/C y O/C. Respecto a la relación H/C, se espera que el carbón Thoresby por presentar el mayor valor, tenga mayor liberación de materia volátil durante la desvolatilización debido a la mayor presencia de hidrógeno en sus estructuras comparativamente con el carbón La Yolanda. Esta tendencia se ha reportado en otro trabajo [12].

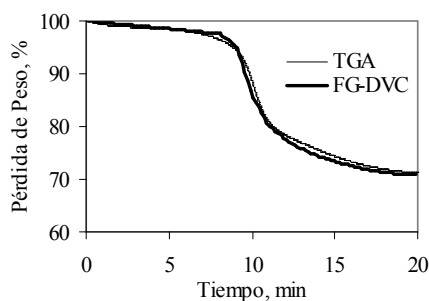
3.2 Comparación de los Datos de TGA con el Modelo FG-DVC

En la Figura 2 se comparan los perfiles de pérdida de peso obtenidos en el TGA y los estimados con el programa FG-DVC, para los carbones analizados. En estas figuras se observa que los datos obtenidos por el programa FG-DVC reproducen muy bien los experimentos realizados en el TGA. Al comparar los perfiles de los dos carbones se observa que ellos presentan similares pérdidas de peso (aproximadamente 28%) al cabo de los 20 min.

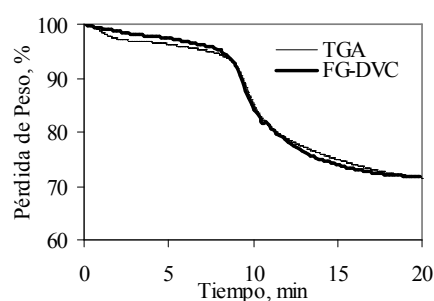
En estos perfiles también se aprecia que la liberación de la humedad sucede en los primeros 5 min. La mayor liberación de humedad la reporta Thoresby. Esto significa que Thoresby tiene mayor contenido de humedad y La Yolanda el menor contenido, lo cual esta de acuerdo con el análisis próximo de estos carbones (Tabla 1).

Arenillas [13] encontró una buena correlación entre los perfiles de pérdida de peso y la composición de los productos de la desvolatilización obtenidos a través de análisis experimental por TGA-MS y teóricos por el modelo FG-DVC. Por este motivo y dado los anteriores resultados, en este trabajo se utilizó el programa FG-DVC para predecir la evolución de alquitranes, CH₄, CO y CO₂, de los carbones La Yolanda y Thoresby. La Figura 3 muestra la velocidad de formación de cada uno de los 4 componentes anteriormente mencionados.

Analizando los perfiles de formación del alquitrán proveniente de los dos carbones en la Figura 3a se observa que tanto la temperatura inicial (350°C) como la temperatura final de formación (700°C) del alquitrán son las mismas para los dos carbones. Sin embargo, estos perfiles se diferencian respecto a la velocidad de formación del alquitrán en cada uno de los carbones, encontrándose que La Yolanda reporta la mayor velocidad máxima de formación (9.2%/min), y Thoresby la menor (7.0%/min).



(a) La Yolanda



(b) Thoresby

Figura 2. Comparación entre perfiles de pérdida de peso obtenido de datos experimentales (TGA) y los predichos por el modelo FG-DVC para dos carbones a 50°C/min.

Figure 2. Comparison between weight loss profiles of experimental data (TGA) and the predicted data by model FG-DVC for two coals at 50°C/min.

Esto posiblemente se relaciona con el contenido de ceniza que presentan los carbones. Se aprecia en los resultados que a mayor contenido de ceniza del carbón Thoresby menor fue su producción de alquitrán, lo cual podría sugerir que la presencia de ceniza disminuye la velocidad de producción de alquitrán. Esto podría comprobarse utilizando más carbones de diferentes características.

La Figura 3b muestra que la mayor producción de metano con la mayor velocidad máxima de formación la presenta el carbón La Yolanda. Esto posiblemente se relaciona con el contenido de carbono elemental, pues el orden decreciente

en el contenido de este elemento en los carbones estudiados, coincide con la reducción en la velocidad máxima de formación del metano por parte de dichos carbones. Resultados similares fueron reportados por Arenillas [13].

La Figura 3c muestra la velocidad de formación del monóxido de carbono. Se observa que el perfil de formación de CO para Thoresby presenta dos picos (uno entre 550 y 700°C, y el otro por encima de 700°C) de velocidad máxima de pérdida de peso, mientras que en el perfil de La Yolanda no se aprecia este efecto.

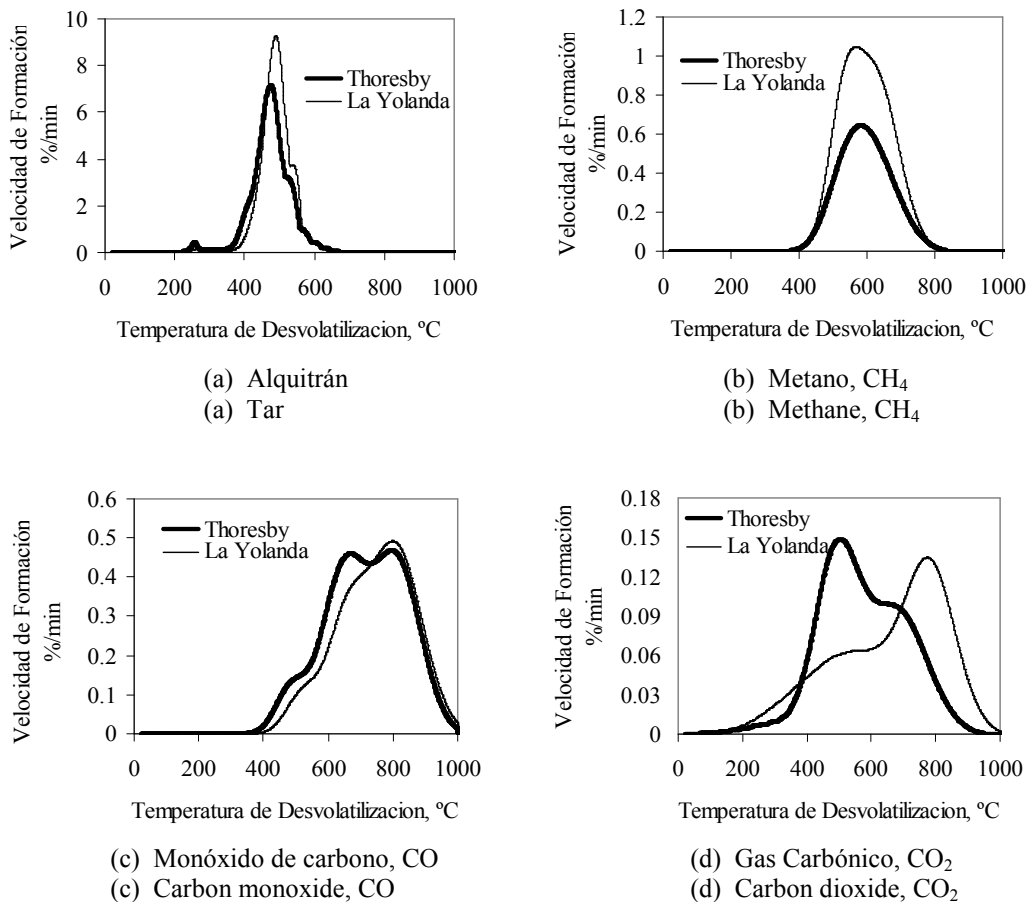


Figura 3. Velocidades de formación del alquitrán, CH₄, CO y CO₂, durante la desvolatilización, predicha por el modelo FG-DVC para los dos carbones a 50°C/min.
Figure 3. Formation Rate of tar, CH₄, CO and CO₂, during the devolatilisation, which is predicted by FG-DVC model for two coals at 50°C/min.

El primer pico se debe a la descomposición de grupos funcionales, que presentan enlaces débiles, producida durante la primera pirolisis, la cual ocurre entre 400 y 700°C (este rango depende de la naturaleza del carbón); mientras que el segundo pico también se debe a la descomposición de grupos funcionales, que presentan enlaces fuertes, producida durante la segunda pirolisis (la cual ocurre a temperaturas mayores a los 700°C) [13, 14]. De los dos carbones Thoresby es el que produce la mayor cantidad de CO y esto posiblemente se debe a su alto contenido de oxígeno (11.17%).

En la Figura 3d se aprecia que Thoresby muestra la mayor velocidad de formación de gas carbónico. Es de anotar que la máxima velocidad de formación de CO₂ para Thoresby se produce a 500°C, mientras que en La Yolanda fue a 750°C. Esto sugiere que gran parte del CO inicialmente formado en el carbón Thoresby, rápidamente pasa a CO₂ debido a su alto contenido de oxígeno, lo cual no ocurre en La Yolanda, pues gran parte de su oxígeno se consumió durante la formación de CO.

En términos generales, se observa que al comparar las velocidades de formación de estos 4 componentes los mayores valores los reporta el alquitrán, seguido por el metano, el monóxido de carbono y finalmente el gas carbónico. Esto quiere decir que el orden decreciente en la cantidad formada de estos componentes es alquitrán > CH₄ > CO > CO₂.

En la Tabla 3 se presentan los valores encontrados por el modelo FG-DVC para la distribución porcentual en base seca libre de

materia mineral (bslmm) del carbono, C; hidrógeno, H; oxígeno, O; nitrógeno, N; y azufre, S; en los productos de la desvolatilización: carbonizado, alquitrán y gas de los carbones.

En esta tabla se observa que el mayor contenido de hidrógeno, oxígeno y azufre del carbón se desprenden haciendo parte del gas durante la desvolatilización en forma de CO, CO₂, SO_x, H₂, O₂, CH₄, y muy bajas proporciones de NO_x, entre otros. También se observa que el alquitrán está compuesto principalmente de carbono, hidrógeno y oxígeno. El carbonizado presenta bajas proporciones de estos elementos, lo que indica que está constituido principalmente de carbono. El nitrógeno se caracteriza porque primordialmente hace parte del carbonizado y del alquitrán, este elemento es liberado en mayor proporción en forma de NO_x durante la combustión del carbonizado y el alquitrán condensado en la superficie del carbonizado. El carbón de la mina Thoresby es el que reporta la mayor cantidad de oxígeno en el gas.

3.3 Liberación de volátiles y factor R

La cantidad de volátiles liberados durante la desvolatilización en el reactor tubular de caída se puede determinar idealmente conociendo el peso del carbón alimentado al reactor y el peso del carbonizado producido. Sin embargo, durante el proceso de desvolatilización hay volátiles que se condensan en las paredes del reactor (en zonas frías) y atrapan partículas de carbonizado, reduciéndose en forma considerable la cantidad de carbonizado producido colectado.

Tabla 3. Distribución elemental (%bslmm) predicha por el modelo FG-DVC a 50°C/min en b.
Table 3. Elemental distribution (%dmmf) predicted by FG-DVC model at 50°C/min.

| Carbón | Compuesto | C, % | H, % | O, % | N, % | S, % |
|------------|-------------|-------|-------|-------|------|------|
| La Yolanda | Carbonizado | 95.92 | 1.69 | 0.01 | 1.50 | 0.88 |
| | Alquitrán | 86.36 | 5.26 | 5.90 | 1.36 | 1.12 |
| | Gas | 46.73 | 19.87 | 29.33 | 0.63 | 3.44 |
| Thoresby | Carbonizado | 95.53 | 1.35 | 0.00 | 1.61 | 1.51 |
| | Alquitrán | 81.76 | 5.36 | 9.71 | 1.46 | 1.71 |
| | Gas | 35.92 | 17.49 | 41.44 | 0.76 | 4.39 |

Esta dificultad se puede superar empleando un método indirecto para calcular el porcentaje de volátiles liberados, donde se utiliza la ceniza presente en el carbón como un trazador [15, 16].

Este método asume que la ceniza presente en el carbón es inerte durante el proceso de desvolatilización y considera además que la masa de ceniza que hay en el carbón es igual a la masa de ceniza en el carbonizado producido. Por lo tanto, el porcentaje en peso de volátiles liberados en base seca libre de cenizas (V_L) será función del contenido de ceniza del carbón ($Cz_{carbón}$) y del carbonizado (Cz_{char}), y se determina por medio de la siguiente ecuación [16]:

$$V_L = \frac{100 * (Cz_{char} - Cz_{carbón})}{Cz_{char} * (100 - Cz_{carbón})} * 100 \quad (1)$$

Otra manera práctica de analizar los resultados de liberación de volátiles se puede hacer por medio del cálculo del Factor R, definido como la relación entre el porcentaje en peso de los volátiles liberados (V_L) y el contenido de materia volátil presente en el carbón medido en el análisis próximo (MV), ambos en base seca libre de cenizas. Este parámetro se calcula por la siguiente ecuación:

$$Factor\ R = \frac{V_L}{MV} \quad (2)$$

Este factor se utiliza como indicador cuantitativo del comportamiento de un carbón durante un rápido calentamiento [16], de tal manera que se puede determinar su grado de desvolatilización.

El Factor R se considera como un parámetro que determina el verdadero potencial de liberación de volátiles de los diferentes carbones bajo condiciones de combustión de carbón pulverizado [17]. Esto significa que por medio del Factor R se compara la pérdida de volátiles ocurrida realmente con la pérdida de volátiles que debería suceder teóricamente [18]. Por lo tanto este parámetro puede tener valores mayores o menores que la unidad. Se han observado [15] valores del Factor R mayores que

la unidad, en ciertos carbones que son expuestos en atmósfera inerte a temperatura elevadas (mayores a 900°C) y altas velocidades de calentamiento ($10^2 - 10^4$ °C/s) y producen mayor cantidad de volátiles que los medidos originalmente por medio del análisis próximo, el cual alcanza una temperatura máxima de 900°C.

En el análisis próximo se considera que por encima de los 900°C no hay presencia de volátiles en el carbón. De igual manera se han observado [18] valores del Factor R menores a la unidad, lo cual se debe a que las partículas de carbón en el reactor tubular de caída liberan menor cantidad de volátiles en comparación con los obtenidos en el análisis próximo, porque sus tiempos de desvolatilización son muy bajos.

En la Tabla 4 se muestra el porcentaje en peso de los volátiles liberados durante el proceso de desvolatilización, al igual que el Factor de desvolatilización R. Se observa que el factor R presenta una tendencia a crecer con el incremento en la temperatura, al igual que con el tiempo de desvolatilización. Sin embargo, hay alguna dispersión de los resultados y es evidencia de la inexactitud inherente en la determinación de este factor, ya que se considera que la materia mineral (contenido de ceniza) no aporta volátiles durante el proceso de desvolatilización.

Se puede apreciar que existe relación entre el Factor R y el rango del carbón (Tabla 4); de esta manera se observa que el carbón de La Yolanda, el cual es el carbón de mayor rango, presenta los valores más bajos del factor R, mientras que el de Thoresby, carbón de menor rango de los dos, muestra los valores más altos de este factor. También se observa que los carbonizados del carbón de La Yolanda obtenidos a 900°C y a los tres tiempos de desvolatilización, producen menor cantidad de volátiles durante el proceso de desvolatilización en el reactor tubular de caída respecto a la cantidad de volátiles determinada por medio del análisis próximo.

Tabla 4. Liberación de volátiles y factor R
Table 4. Volatile released and R factor

| Carbón | Tiempo de desvolatilización, ms | Volátiles liberados, V _L , % en base seca libre de ceniza | | | Factor R | | |
|------------|---------------------------------|--|---------|---------|----------|---------|---------|
| | | 900 °C | 1000 °C | 1100 °C | 900 °C | 1000 °C | 1100 °C |
| La Yolanda | 100 | 33.5 | 36.1 | 37.7 | 0.98 | 1.06 | 1.10 |
| | 150 | 33.1 | 36.2 | 37.4 | 0.97 | 1.06 | 1.10 |
| | 300 | 31.7 | 36.7 | 39.0 | 0.93 | 1.07 | 1.14 |
| Thoresby | 100 | 34.8 | 37.9 | 38.1 | 1.01 | 1.10 | 1.10 |
| | 150 | 35.0 | 39.7 | 40.5 | 1.01 | 1.15 | 1.17 |
| | 300 | 43.0 | 40.3 | 39.2 | 1.24 | 1.17 | 1.13 |

4. CONCLUSIONES

El análisis de productos del proceso de desvolatilización a través del modelo FG-DVC es de gran importancia a nivel ambiental, dado que se puede predecir la velocidad de formación y la cantidad de estos productos principalmente de emisiones gaseosas. Este modelo suministra información necesaria para calcular los parámetros cinéticos de los compuestos gaseosos individuales, de la formación de alquitrán y de las emisiones gaseosas totales. Esto indica que se puede valorar el impacto ambiental que producirían los diferentes carbones durante la pirólisis en general y en su primera etapa de combustión.

Se comprueba que el modelo FG-DVC predice la desvolatilización, de los carbones La Yolanda y Thoresby, realizada a baja velocidad de calentamiento en un Analizador Termogravimétrico.

El orden decreciente en la velocidad de formación y cantidad formada de los principales productos de la desvolatilización de los carbones La Yolanda y Thoresby es alquitrán > CH₄ > CO > CO₂.

Respecto a la distribución del hidrógeno, oxígeno, nitrógeno y azufre en las productos de la desvolatilización, se encontró que el hidrogeno, el oxígeno y el azufre se concentran en el gas, mientras que el contenido de carbono y nitrógeno es mayor en el carbonizado.

Se encontró que la liberación de compuestos volátiles se hace mayor con el aumento de la temperatura y del tiempo de desvolatilización, y depende de la naturaleza química del carbón, y; además, se encontró una liberación de volátiles de alrededor del 30%. En cuanto al factor R, se observó que el carbón de Thoresby presenta un potencial de liberación de volátiles mayor que el carbón de la mina La Yolanda.

5. AGRADECIMIENTOS

Los autores dan sus sinceros agradecimientos a COLCIENCIAS por el soporte financiero y a la doctora Ana Arenillas de la Puente del Instituto Nacional del Carbón (INCAR, Oviedo-España) por sus aportes científicos al proyecto.

REFERENCIAS

- [1] VAN-KREVELEN, VAN-HEERDEN and HUNTGENS, F.J. FUEL, 30, 253, 1951.
- [2] MIURA, T. Advanced Coal Combustion, Norio Arai and Stuart Churchill, Advanced Energy Conversion Systems, 2000.
- [3] KOBAYASHI, H., HOWARD, J.B. and SALOFIM, A.F. Memorias Sixteenth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, PA, 411, 1977.

- [4] VISONA, S.P. AND STANMORE, B.R., Modeling NO_x release from a single coal particle. I. formation of NO from volatile nitrogen, *Comb. and Flame*, 105, 92-103, 1996.
- [5] ANTHONY, D.B., HOWARD, J.B., HOTTEL, H.C. and MEISSNER, H.P. Rapid devolatilization of pulverized coal. *Memorias Fifteenth Symposium (International) on Combustion*. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA, pp. 1303-1317, 1974.
- [6] SOLOMON, P.R., HAMBLEN, D.G., CARANGELO, R.M., SERIO, M.A. and DESHPANDE, G.V. General model of coal devolatilization, *Energy & Fuels*, 2, 405-422, 1988.
- [7] BREWSTER, B., SMOOT, D., BARTHELSON, S. and THORNOCK D. Model comparisons with drop tube combustion data for various devolatilization submodels, *Energy & Fuels*, 9, 870-879, 1995.
- [8] NIKSA, S. FLASHCHAIN theory for rapid coal devolatilization kinetics. 1. formulation, *Energy & Fuels*, 5, 647-665, 1991.
- [9] NIKSA, S. FLASHCHAIN theory for rapid coal devolatilization kinetics. 2. impact of operating conditions, *Energy & Fuels*, 5, 665-673, 1991.
- [10] GRANT, D., PUGMIRE, R., FLETCHER, T. and KERSTEIN, A. Chemical model of coal devolatilization using percolation lattice statistics, *Energy & Fuels*, 3, 175-186, 1989.
- [11] ARENILLAS, A. Influencia del proceso de desvolatilización sobre la reducción de emisiones de óxidos de nitrógeno en la combustión del carbón [Tesis Doctoral]. Universidad de Oviedo. Departamento de Ingeniería Química y Tecnología del Medio Ambiente, Oviedo, España, 1998.
- [12] ARENILLAS, A., RUBIERA, F., PIS J.J., CUESTA, M.J., IGLESIAS, M.J., JIMÉNEZ, A. and SUÁREZ-RUIZ, I. Thermal behaviour during the pyrolysis of low rank perhydrous coals, *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 68-69, 371-385, 2003.
- [13] ARENILLAS A., RUBIERA, F., PEVIDA C. and PIS, J.J. A comparison of different methods for predicting coal devolatilisation kinetics, *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 58-59, 685-701, 2001.
- [14] LÁZARO, M.J., MOLINER, R. and SUELVE, I., Non-isothermal and isothermal technique to evaluate kinetic parameters of coal pyrolysis, *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 47, 149-163, 1998.
- [15] BADZIOCH, S. AND HAWKSLEY, M. Kinetics of thermal decomposition of pulverized coal particles, *Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop.*, 9, 4, 521-530, 1970.
- [16] BARRANCO, R., CLOKE, M. and LESTER, E. The effect of operating conditions and coal type on char reactivity and morphology during combustion in a drop tube furnace. *Memorias Congreso Internacional del Carbón*, Australia, 2000.
- [17] GIBBINS, J.R., MAN, C.K. and PENDLEBURY, Determination of rapid heating volatile matter contents as a routine test. *Memorias 1st International Conference on Combustion Technologies for Clean Environment*, Portugal, 729-741, 1991.
- [18] LESTER, E. The characterization of coals for combustion [Ph.D. Thesis], University of Nottingham, England, 1994.