



Universidade Federal de Campina Grande
Centro de Ciências e Tecnologia
Unidade Acadêmica de Engenharia Química
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO PRÉ-AQUECIMENTO DE AR EM
CALCINADORES DE ALUMINA ATRAVÉS DE TÉCNICAS DE
FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD)**

ANDREY OLIVEIRA DE SOUZA

Campina Grande – Paraíba
Fevereiro de 2011

ANDREY OLIVEIRA DE SOUZA

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO PRÉ-AQUECIMENTO DE AR EM
CALCINADORES DE ALUMINA ATRAVÉS DE TÉCNICAS DE
FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD)**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Campina Grande, como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Área de Concentração: Modelagem e Simulação Numérica de Processos

Orientador: Prof. Dr. José Jailson Nicácio Alves

Campina Grande – Paraíba

Fevereiro de 2011



FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA CENTRAL DA UFCC

S729s

Souza, Andrey Oliveira de.

Simulação numérica do pré-aquecimento de ar em calcinadores de Alumina através de técnicas de fluidodinâmica Computacional (CFD) / Andrey Oliveira de Souza. — Campina Grande, 2011.

72f. : il.

Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e tecnologia

Referências.

Orientador: Prof^o. Dr. José Jailson Nicácio Alves.

1. Fluidodinâmica Computacional (CFD). 2. Pré-aquecedor. 3. Combustão. 4. Perfil de Temperatura. 5. Vetor velocidade. I. Título.

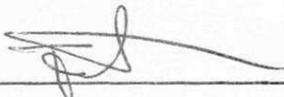
CDU –662.612 (043)

ANDREY OLIVEIRA DE SOUZA

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO PRÉ-AQUECIMENTO DE AR EM
CALCINADORES DE ALUMINA ATRAVÉS DE TÉCNICAS DE
FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD)**

DISSERTAÇÃO APRESENTADA EM 18/02/2011

BANCA EXAMINADORA



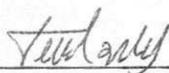
Dr. José Jailson Nicácio Alves

Orientador (UFCG)



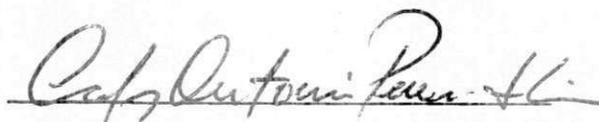
Dr. Romildo Pereira Brito

Professor (UFCG)



Dr. Luís Gonzaga S. Vasconcelos

Professor (UFCG)



Dr. Carlos Antonio Pereira de Lima

Professor (UEPB)

Campina Grande-PB

2011

AGRADECIMENTOS

À DEUS, pela sua misericórdia, por todas as bênçãos que me oferece e por me guiar com tanto amor e carinho em meus desafios.

Aos meus pais, Adinécio e Germana, pelo apoio, dedicação e preocupação com minha formação como profissional e como pessoa.

Aos meus irmãos, Necinho e Adrienne, que me incentivaram e procuraram me ajudar de todas as formas.

A minha esposa e a filha, Livia e Alice, que juntas representam minha grande motivação para seguir em frente em busca de mais conquistas.

Aos amigos que sempre estão ao meu lado, acreditando, apoiando e torcendo por mim.

Ao meu orientador José Jailson Nicácio Alves, pela confiança e orientação prestada.

A Antonio Tavernard e Gustavo Cursino, por tanto terem contribuído para realização deste trabalho.

A todos que compõe o LARCA, entre alunos e professores, por terem proporcionado um ambiente de trabalho agradável de amizade, companheirismo e ajuda mútua.

Ao coordenador do programa de pós-graduação em engenharia química (PPGEQ), Dr. Romildo Pereira Brito, pela presteza.

Aos Professores e funcionários da UAEQ/UFCG.

A Universidade Federal de Campina Grande, pela oportunidade concedida.

Ao CNPq pela suporte financeiro.

A todos que, direta ou indiretamente, contribuíram para a concretização deste trabalho.

SUMÁRIO

AGRADECIMENTOS.....	4
SUMÁRIO.....	5
LISTA DE FIGURA.....	7
LISTA DE TABELAS E QUADROS.....	8
RESUMO.....	9
ABSTRACT.....	10
1. INTRODUÇÃO.....	11
1.2 OBJETIVO DO TRABALHO.....	12
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	13
2.1 Processo Bayer.....	13
2.2 Calcinadores.....	16
2.3 Combustão.....	21
2.4 Estudos realizados acerca de modelos baseados em CFD aplicados para simulação de sistemas de combustão.....	23
3. MODELAGEM MATEMÁTICA.....	26
3.1 Equações de Conservação.....	26
3.2 Formulações das Equações Médias Temporais.....	28
3.3 Conservação das espécies química.....	31
3.4 Combustão Turbulenta.....	32
4. MÉTODO NUMÉRICO.....	35
5. FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL.....	40
5.1 Aplicação da técnica CFD na simulação do pré-aquecedor.....	41

6. RESULTADOS	45
6.1 Geometria e malha do pré-aquecedor	45
6.2 Visualização dos Resultados	47
6.3 Estudo de Caso	53
7. CONCLUSÕES.....	56
7.1 Sugestões para trabalhos futuros	56
8. REFERÊNCIAS	57
APÊNDICE A.....	61
APÊNDICE B.....	63
APÊNDICE C	65

LISTA DE FIGURA

FIGURA 1 - FLUXOGRAMA E ESQUEMA DO PROCESSO BAYER	16
FIGURA 2 - FORNO ROTATIVO.....	18
FIGURA 3 - CALCINADOR OPERANDO EM LEITO FLUIDIZADO (DESTAQUE PARA O PRÉ-AQUECEDOR). 21	
FIGURA 4 - MALHA BIDIMENSIONAL (DEFINIÇÕES DO VOLUME DE CONTROLE).....	36
FIGURA 5 - DEFINIÇÃO DOS PONTOS DE INTEGRAÇÃO PARA UM ELEMENTO 2-D QUADRILÁTERO.....	38
FIGURA 6 - GEOMETRIA DO PRÉ-AQUECEDOR (DETALHE DAS ENTRADAS DE COMBUSTÍVEL E AR)	45
FIGURA 7 - MALHA UTILIZADA NA SIMULAÇÃO (EM DESTAQUE: DETALHES DA MALHA PRODUZIDA)	46
FIGURA 8 - PERFIL DE TEMPERATURA NO PLANO AXIAL (XY) DO PRÉ-AQUECEDOR	47
FIGURA 9 - PERFIL DE CONCENTRAÇÃO DE NO NO PLANO AXIAL (XY) DO PRÉ-AQUECEDOR	49
FIGURA 10 - PERFIL DE CONCENTRAÇÃO DE O ₂ NO PLANO AXIAL (XY) DO PRÉ-AQUECEDOR.....	50
FIGURA 11 – VETORES VELOCIDADE DO FLUXO DE AR AO LONGO DO PLANO (AXIAL) XY DO PRÉ-AQUECEDOR.....	50
FIGURA 12 - DETALHE DOS VETORES VELOCIDADE NA REGIÃO DE MAIOR TEMPERATURA.....	51
FIGURA 13 - PERFIL DE TEMPERATURA E VETORES VELOCIDADE NO PLANO RADIAL (YZ) QUE CORTA AS ENTRADAS DO AR SECUNDÁRIO	52
FIGURA 14 - PERFIL DE TEMPERATURA E VETORES VELOCIDADE AO LONGO DO PLANO AXIAL (XZ) DO PRÉ-AQUECEDOR.....	52

FIGURA 15 - PERFIL DE TEMPERATURA AO LONGO DOS CONTORNOS NO PRÉ-AQUECEDOR	53
FIGURA 16 – VISÃO GERAL DO PRÉ-AQUECEDOR.....	54
FIGURA 17 – REGIÃO DO PRÉ-AQUECEDOR INCLUINDO ÁREA AFETADA DANIFICADA, SEGUNDO INFORMAÇÕES DISPONIBILIZADAS	54
FIGURA 18 - ÁREA AFETADA, SEGUNDO INFORMAÇÕES DISPONIBILIZADAS PELA INDÚSTRIA	55
FIGURA 19 - ÁREA AFETADA, SEGUNDO SIMULAÇÃO REALIZADA NA UFCG	55

LISTA DE TABELAS E QUADROS

TABELA 1 – ENERGIA CONSUMIDA NO PROCESSO DE CALCINAÇÃO.....	19
TABELA 2 - CONDIÇÕES OPERACIONAIS ENCONTRADAS NA INDÚSTRIA	42
QUADRO 1 - FUNDAMENTOS DA FLUIDODINÂMICA.....	26

SOUZA, Andrey Oliveira de. **Simulação Numérica do Pré-Aquecimento de Ar em Calcinadores de Alumina através de Técnicas de Fluidodinâmica Computacional (CFD)**. 2011. 72 f. Dissertação (Mestrado – Engenharia Química) – Universidade Federal de Campina Grande, 2011. Orientador: Dr. José Jailson Nicácio Alves.

RESUMO

A aplicação de técnicas de fluidodinâmica computacional (CFD) foi utilizada para simulação do pré-aquecimento de ar em um sistema de combustão encontrado em calcinadores de alumina do tipo leito fluidizado. Em se tratando de eficiência energética e qualidade do produto, bem como custo de produção e manutenção, o sistema de combustão dos calcinadores corresponde ao sistema mais importante no processo de refino da alumina. Dentre os impactos negativos relacionados a esse sistema, destaca-se, neste trabalho, as altas temperaturas encontradas na região do domo do pré-aquecedor de ar do calcinador, representada pela zona primária de combustão, o que indica um desgaste prematuro do material refratário deste equipamento, e, assim, colocando a integridade do calcinador em risco. O objetivo principal deste trabalho foi, através do uso de técnicas de fluidodinâmica computacional (CFD), descrever o comportamento fluidodinâmico do ar no pré-aquecedor, com a intenção de prever a localização da falha prematura apresentada, bem como identificar as possíveis causas do problema. A modelagem e simulação numérica do processo foram feitas a partir do *software* CFX. A geometria do pré-aquecedor foi gerada de acordo com o desenho técnico do equipamento disponibilizado. Adotou-se o uso de malha não estruturada, sendo mais refinada na região de entrada do queimador. As condições operacionais foram ajustadas na modelagem de acordo com as condições encontradas na indústria. Para efeito de simulação, o CH₄ foi posto como sendo o combustível. As equações de conservação foram resolvidas numericamente a partir do método dos volumes finitos, fazendo uso da malha gerada. Os resultados foram avaliados a partir da análise dos perfis de temperatura e vetores de velocidade do ar no pré-aquecedor. De acordo com a visualização destes perfis foi possível identificar a formação de um vórtice na altura da entrada de ar lateral, promovendo um turbilhão que se desloca em um caminho preferencial na direção da parede do vaso do pré-aquecedor. Na região do turbilhão percebe-se uma alta concentração de energia, justificada pela melhor mistura entre o oxigênio do ar e o combustível, explicando o aumento exagerado da temperatura nessa região. A região em que essa alta concentração de energia atinge a parede é coerente com a região onde ocorre a falha prematura do refratário. Uma melhor homogeneização da mistura do ar com o combustível, evitando caminhos preferenciais, pode ser a solução do problema.

Palavras-chave: Fluidodinâmica Computacional (CFD), Pré-aquecedor, Combustão, Perfil de temperatura e Vetor velocidade.

SOUZA, Andrey Oliveira de. **Numerical Simulation of Pre-Heating of Air in Alumina Calciners through Computational Fluid Dynamics Method (CFD)**. 2011. 72 f. Paper (Master's - Chemistry Engineering). Federal University of Campina Grande, Campina Grande-PB, 2011. Tutor:: Dr. José Jailson Nicácio Alves.

ABSTRACT

The application of computational fluid dynamic (CFD) method was used to simulate the pre-heating of air in a combustion system found in alumina fluidized bed calciners. When talking about energy efficiency and product quality, as well as production and maintenance costs, the calciner combustion system corresponds to the most important system in the alumina refining process. Among the negative impacts related to this system, this work highlights the high temperatures found in the area of the air pre-heater dome of the calciner, represented by the primary combustion zone, which indicates a premature stress of this equipment's refractory material, and thus leaving the calciner's integrity at risk. The main objective of this work was to describe the fluid dynamic behavior of the air in the pre-heater through computational fluid dynamics (CFD) method, in order to predict the location of the premature failure presented, as well as to identify possible causes of the problem. Modeling and numerical simulation of the process were carried out using the CFX software. The geometry of the pre-heater was generated according to the technical design of the available equipment. The use of an unstructured mesh was adopted, being it more refined in the input burner area. The operating conditions were adjusted according to the conditions found in industry. For simulation purposes, CH₄ was inputted as fuel. The conservation equations were solved numerically through the finite volume method, using the generated mesh. The results were evaluated by analyzing the profiles of temperature and air speed vectors in the pre-heater. According to those profiles visualization, it was possible to identify the formation of a vortex close to the side air inlet, promoting a whirlpool moving in a preferential course in the direction of the vessel wall of the pre-heater. In region of the vortex a high concentration of energy can be observed, justified by the greatest mixture between the air's oxygen and the fuel, which explains the excessive increase in temperature in this region. The area where this high concentration of energy hits the wall is consistent to the region where the premature failure of the refractory occurs. A better homogenization of the mixture of air with fuel, avoiding preferential pathways, may be the solution to the problem.

Keywords: Computational Fluid Dynamics (CFD), Pre-heater, Combustion Temperature Profile and Speed Vector.

Capítulo 1

1. INTRODUÇÃO

A produção do alumínio metálico se dá pelo processo Hall-Héroult, onde o alumínio é obtido pela redução da alumina SGA (smelting grade alumina), também chamada de alumina calcinada. Cerca de 20% da energia total requerida para produzir um lingote de alumínio é gasto na produção da alumina SGA, desde a extração da bauxita até a obtenção da alumina calcinada (COCHRAN, 1981). O processo de obtenção da alumina se dá pelo processo Bayer.

O sistema Bayer permite, por meio do refino da bauxita extraída, que se obtenha a alumina tri-hidratada ($\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$). No estágio final deste processo, o calcinador, operando a altas temperaturas e a baixas pressões, retira a água presente na molécula (água de cristalização) transformando-a em alumina SGA (Al_2O_3).

Em se tratando de eficiência energética e qualidade da alumina, bem como custo de produção e manutenção, o sistema de combustão nos calcinadores corresponde ao mais importante no processo da refinaria. Tal sistema se inicia em um vaso, chamado pré-aquecedor de ar, seguido por outro, chamado de forno, onde acontece a conversão.

Vários impactos negativos são observados em aplicações industriais, no que diz respeito ao sistema de combustão. Neste trabalho, destaca-se o superaquecimento local encontrado na parede dos vasos. Imagina-se que uma provável causa deste problema estar relacionada à fluidodinâmica do ar que passa pelo pré-aquecedor, e é então alimentado ao forno, visto que a maneira com que o ar escoar no interior dos referidos vasos, interfere na estrutura da chama e qualidade da mistura entre os reagentes da combustão, promovendo maior ou menor geração de energia em diferentes locais.

Avanços recentes no poder computacional, juntamente com poderosos gráficos e manipulações 3D interativas de modelos, tem favorecido o uso de técnicas de fluidodinâmica computacional (CFD) no processo de criar modelos fluidodinâmicos e analisar os resultados de forma muito menos trabalhosa, reduzindo tempo e, assim, custo.

1.2 Objetivo do Trabalho

Quando não se dispõe de um modelo matemático validado de determinado equipamento, a operação é basicamente realizada com base no julgamento de engenharia, ou seja, na experiência adquirida ao longo dos anos de operação, através das análises das causas e efeitos de cada modificação sobre o processo.

O objetivo geral deste trabalho é descrever a fluidodinâmica do ar em um pré-aquecedor encontrado em calcinadores de alumina, através da modelagem e simulação numérica do processo, utilizando técnicas de fluidodinâmica computacional (CFD) através do *software* CFX.

O objetivo específico deste estudo é apresentar um modelo fluidodinâmico computacional capaz de prever o superaquecimento local no pré-aquecedor, a partir da visualização da distribuição de temperatura ao longo deste vaso, baseado nos parâmetros que fazem parte do processo, e assim, poder identificar as prováveis causas do problema.

Capítulo 2

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A revisão bibliográfica realizada visou o entendimento geral de como funciona uma refinaria para produção de alumina, tomando com base o processo Bayer. Deu-se ênfase na etapa de calcinação do processo de refino, passando desde um breve histórico de desenvolvimento de diferentes *designs* de calcinadores, até o estudo sobre o processo de combustão que ocorre nos calcinadores, visto ser o foco do trabalho.

Por fim, foi feita uma revisão de trabalhos relacionados à aplicação do método CFD com finalidade de resolução de problemas que envolvem combustão, dando ênfase aos casos que envolvem sistema de combustão turbulenta do tipo *non premixed flames*, onde o ar e o combustível não entram no combustor homogeneamente misturados, por ser o caso do sistema de combustão encontrado nos calcinadores em estudo.

2.1 Processo Bayer

Basicamente, o processo de refino da alumina está baseado no processo Bayer. Em 1888, Karl Josef Bayer desenvolveu e patenteou este processo, hoje internacionalmente conhecido como “Processo Bayer” (HIND et al., 1999). O processo Bayer representa um marco na metalurgia, sendo considerado, ao lado do processo de cianetação para tratamento de ouro e prata, o marco do nascimento da hidrometalurgia moderna (HABASHI, 2005).

O processo Bayer continua a ser o meio mais econômico para produção de alumina a partir do minério de bauxita (SIDRAK, 2001), sendo utilizado até hoje praticamente sem mudanças significativas (HIND et al., 1999). Ele foi originalmente desenvolvido para atender uma demanda da indústria têxtil, que utiliza o Al_2O_3 como fixador para o tingimento de algodão. Porém, somente com a sua associação ao

processo eletrolítico de obtenção do alumínio metálico, processo Hall-Heroult, ganhou importância na metalurgia.

Desconsiderando as peculiaridades de cada planta, a produção de alumina através do processo Bayer pode ser esquematicamente apresentada conforme a FIG.1.

Cursino (2009), em seu exame de qualificação de doutorado, descreve o processo Bayer como segue:

O estágio inicial, denominado digestão, envolve, num primeiro momento, a moagem da bauxita, seguida pela digestão propriamente dita com uma solução cáustica de hidróxido de sódio (NaOH) sob temperatura e pressão adequadas.

O principal objetivo dessa etapa é dissolver o hidróxido de alumínio presente na bauxita e reduzir o teor de sílica, para garantir a pureza adequada aos produtos finais.

As condições em que se processa a digestão (concentração, temperatura e pressão), variam de acordo com as propriedades da bauxita. Plantas modernas comumente operam em temperaturas entre 200 e 240 °C, e pressão em torno de 30 atm (WAO, 2010). Nestas condições a maioria das espécies contendo alumínio é dissolvida, formando um licor verde, de acordo com a equação 1:



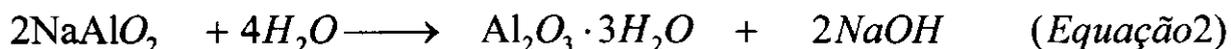
Os insolúveis, bem como os produtos da dessilicação, permanecem sólidos na forma de impurezas. O objetivo da clarificação no processo Bayer é a remoção de resíduos sólidos no licor, após a digestão da bauxita, para garantir a qualidade do hidrato na precipitação. A clarificação do licor é realizada em duas etapas: espessamento e filtração.

Na primeira etapa da clarificação, o licor é bombeado para o espessador. Trata-se de um sistema de separação sólido-líquido com duas saídas: *overflow* e *underflow*. O primeiro é o licor clarificado, que sai do espessador por transbordo, e é

enviado para um tanque. O segundo é o resíduo de bauxita com alta concentração de sólidos. Na segunda etapa de clarificação, o licor é filtrado em filtros prensa.

Na etapa de precipitação, o licor verde (aluminato de sódio – NaAlO_2), livre dos sólidos não solúveis, deve ser reconvertido ao hidróxido de alumínio (alumina tri-hidratada ou gibsita – $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$). Para tanto, deseja-se que uma reação inversa à digestão ocorra. Como a solubilidade do hidrato em soda cáustica (NaOH) aumenta com a temperatura, a reação inversa é favorecida pelo resfriamento da solução. A partir desta reação, além da obtenção do hidrato, recupera-se a soda cáustica para ser reaproveitada no processo.

Inicialmente é reduzida a temperatura do licor para aproximadamente 83°C , por meio da passagem pelo condensador barométrico. Em seguida, são adicionadas sementes que operarão como agentes nucleantes, facilitando a nucleação e o crescimento dos cristais de hidróxido, que anteriormente estavam em solução. A reação é a que se segue:



Na etapa final do processo de obtenção da alumina, acontece a calcinação. A principal função dos calcinadores é remover moléculas de água da alumina tri-hidratada ($\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$) (SIDRAK, 2001). Assim, o objetivo desta etapa é a conversão do hidrato em uma mistura cristalina de formas alotrópicas de Al_2O_3 , ou uma fase específica. O hidrato recém chegado da precipitação é lavado e filtrado, seguindo para secagem, calcinação e posterior resfriamento. A alumina obtida deve atender as especificações de tamanho de partícula, granulometria, área superficial, perda ao fogo (LOI) e conteúdo de α -alumina desejada para o tipo que está sendo produzida. Além disso, a quantidade de sódio na alumina grau metalúrgico (alumina SGA – smelting grade alumina) deve ser baixa e a energia empregada na calcinação próxima à requerida para decomposição do hidrato.

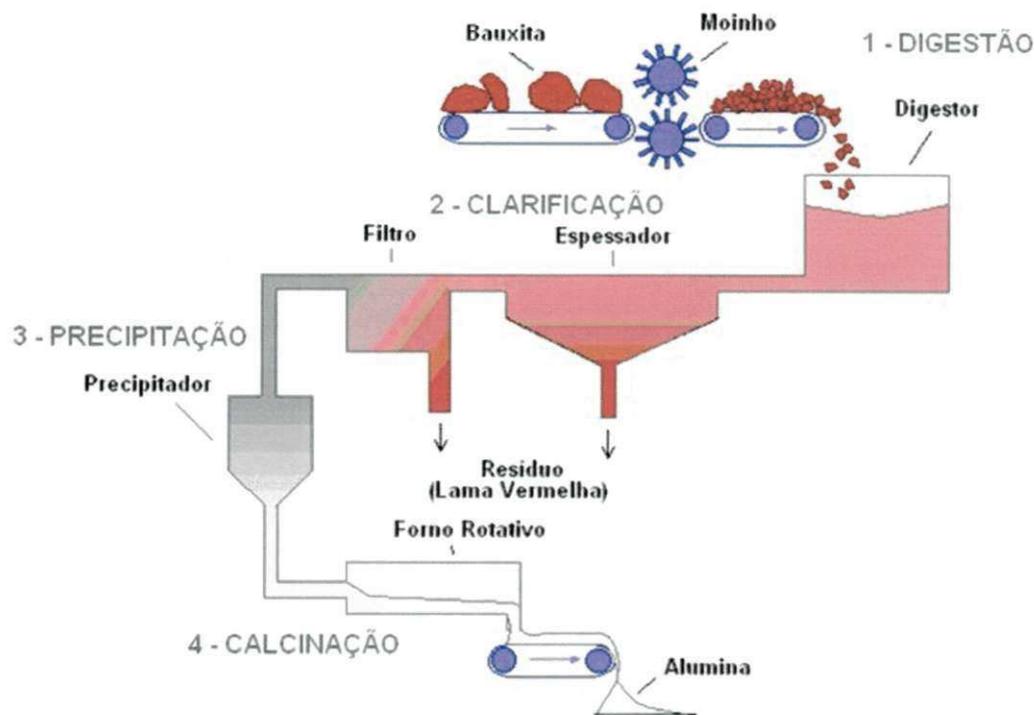


FIGURA 1 - Fluxograma e Esquema do Processo Bayer

2.2 Calcinaidores

Processos de calcinação são tipicamente reações que necessariamente englobam a decomposição de uma fase sólida em outra fase sólida e o desprendimento de gás/vapor (material volátil). Dessa forma, a reação de calcinação consiste na eliminação da água de cristalização do hidrato, como segue:



Nos calcinaidores, uma atenção especial deve ser dada na regulação da temperatura do forno, visto que este fator determina o índice de mistura residual na alumina (SIDRAK, 2001) e interfere diretamente na eficiência térmica.

Antigamente o hidrato era calcinado em fornos revérberos. Neste tipo de forno as substâncias eram aquecidas indiretamente, por meio de um arco voltaico que, em temperaturas elevadas, irradiava forte calor sobre o chão do forno. Os fornos revérberos eram de baixa eficiência térmica e de baixa capacidade de produção. Foi

quando C. M. Hall sugeriu o uso de fornos rotativos (Rotary Kilns) para esse propósito.

O *design* original dos fornos rotativos (com diâmetros diferentes) tinha como objetivo manter a velocidade do gás constante ao longo do comprimento do forno. Essa idéia foi logo abandonada e os fornos rotativos com diâmetro uniforme foram construídos e instalados. Pelo menos dois terços de tais fornos eram revestidos com tijolos refratários e os primeiros fornos eram alimentados manualmente.

Outra evolução gradual dos fornos rotativos foi o aumento de seu comprimento, de modo que proporcionasse maior troca térmica entre os gases de combustão e o material que estava sendo calcinado. Desta forma foi possível reduzir a temperatura dos gases de exaustão do forno e, conseqüentemente, a quantidade de combustível requerida para calcinação.

Uma posterior redução do consumo de combustível foi efetuada com a instalação de um resfriador (cooler), através do qual parte da energia contida na alumina calcinada pôde ser transferida para o ar de combustão que alimenta o forno. A figura 2, disponibilizada por Cursino (2009) mostra uma ilustração de um forno rotativo.

Calcination

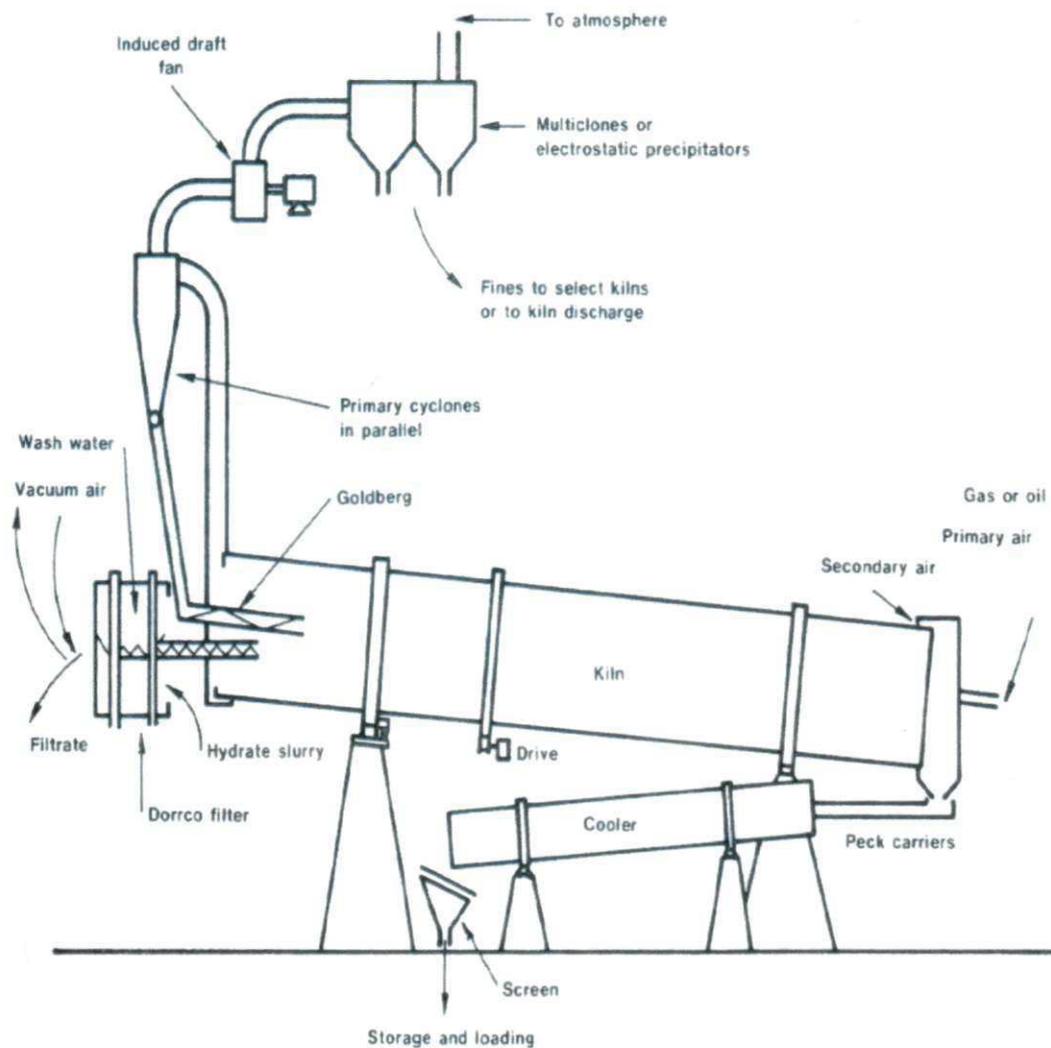


FIGURA 2 - Forno rotativo

Todo o trabalho de desenvolvimento em novos equipamentos e melhores práticas para os fornos rotativos tornaram-se obsoletos com o aparecimento dos calcinadores tipo estacionário. O qual trata-se de uma combinação de leito fluidizado (ar de soprador) e os gases dispersados durante as mudanças de fase da alumina no processo de calcinação.

Em comparação com os fornos rotativos, a primeira grande vantagem dos calcinadores estacionários foi a alta taxa de transferência de calor, devido estarem as partículas intimamente misturadas com os gases quentes de combustão.

Outra vantagem dos calcinadores estacionários é que a homogeneização da mistura, obtida em leito fluidizado, corrobora para melhorar a uniformidade do produto. Além disso, o hidrato úmido é um excelente dissipador de calor em temperaturas relativamente baixas.

Ainda em comparação aos fornos rotativos, os calcinadores de leito fluidizado são mais baratos em termos de custo capital, tem menor custo de manutenção, o equipamento e o refratário não estão sujeitos ao stress acarretado pela contínua rotação do material, tem maior capacidade de produção e automação, além de demandarem cerca de 80% menos energia (LUSKY, 1979), demandando, com isso, um menor consumo de combustível. Um comparativo da eficiência energética entre os dois tipos de processos de calcinação é encontrado em Cursino (2009) e pode ser visto na TAB 1.

TABELA 1 – Energia consumida no processo de calcinação

	MJ / Ton Al ₂ O ₃	
	Calcinador Leito Fluidizado	Forno Rotativo
Energia da Reação	2056	2056
Energia na Alumina Calcinada	154	739
Energia nos Gases de Combustão	896	1444
Radiação	151	547
TOTAL	3257	4786

Em um sistema de calcinação que adota calcinadores estacionários, o hidrato, com umidade de aproximadamente 10%, é levado a um secador que opera em leito fluidizado (aproximadamente 300°C) para a remoção da água adsorvida. O hidrato segue sendo transportado por todo o sistema de calcinação para ser então,

descarregado no forno e direcionado ao vaso de retenção (HV). As condições de forno e do vaso de retenção (nível e temperatura de operação) ditam as características finais da alumina em produção. As temperaturas podem variar de 950°C a 1250°C, dependendo da campanha de alumina e da taxa de produção.

O produto calcinado e ainda parte do material não-calcinado percorre uma série de dutos e ciclones, onde há uma constante seleção granulométrica e as partículas consideradas finas são redirecionadas a outros ciclones para reclassificação. Caso não esteja dentro das especificações do referido produto, esse material fino é coletado por um equipamento eletrostático, que armazena todo esse conteúdo. Após a etapa de calcinação, o material é resfriado para ser enviado para o processo obtenção do alumínio.

Um esquema de um calcinador operando em leito fluidizado é demonstrado na FIG. 3.

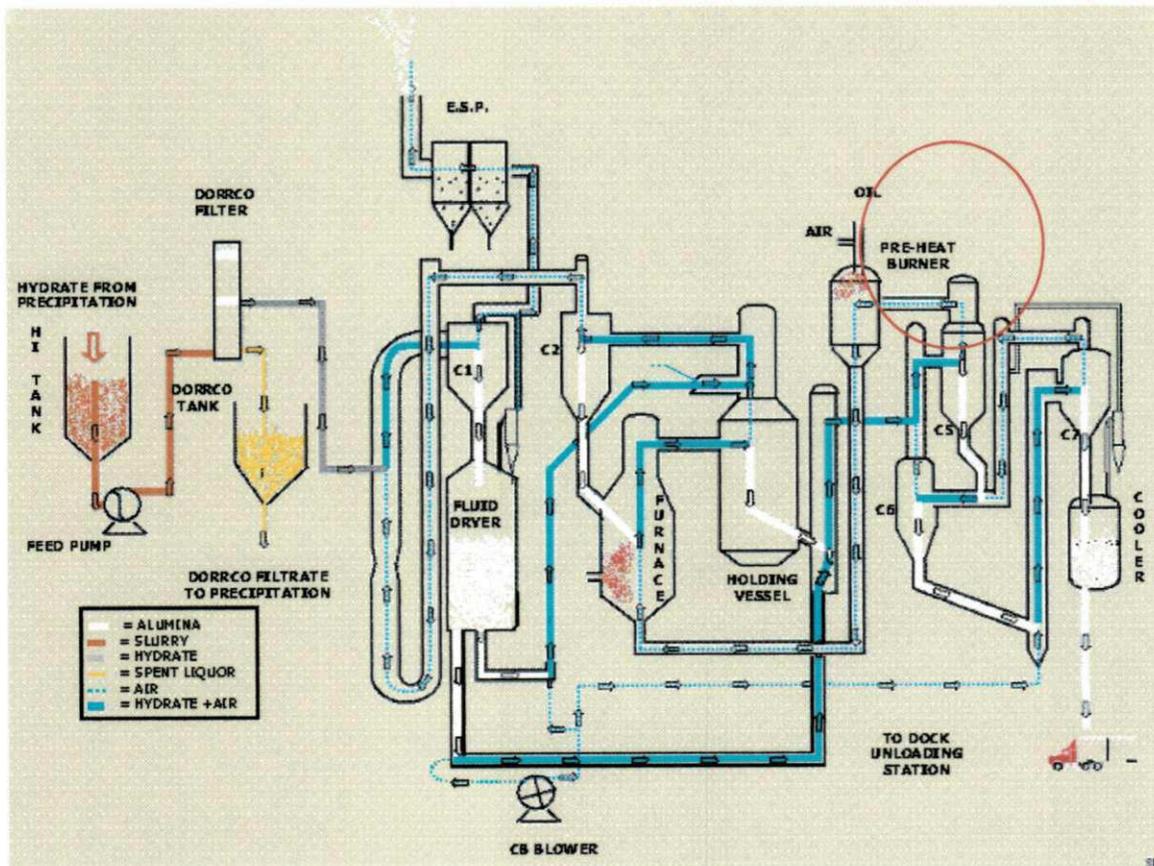


FIGURA 3 - Calcinador operando em leito fluidizado (destaque para o pré-aquecedor).

2.3 Combustão

No processo de calcinação, a alumina tri-hidratada é convertida em alumina SGA através do contato com uma fonte de energia térmica. Essa fonte é usualmente os gases do processo de combustão e vapor d'água superaquecido (ZIVKOVIC, Z.D. and FILIPOVIC, M., 1981).

Segundo Lixing, 1993, combustão é uma reação química acompanhada por liberação de calor e emissão de um feixe de luz. Tratam-se de reações de oxidação de combustíveis sólidos (metais ou não-metais), líquidos ou gasosos. Ainda, reações de dissociação, como a de cloração, fluoração e nitração, podem também ser consideradas reações de combustão, desde que tenham alto efeito térmico.

No processo de calcinação a obtenção de calor no pré-aquecedor e no forno principal se dá através da combustão turbulenta, obtida por meio da injeção do combustível e o do oxidante para o interior do vaso, e pela promoção da mistura entre estes reagentes através de movimentos giratórios (*swirl*).

A taxa de reação da combustão pode ser limitada pela sua cinética ou pela sua mistura física. Enquanto a cinética descreve a taxa na qual as moléculas colidem com energia suficiente para alcançarem a energia de ativação e reagirem, a mistura física descreve o processo de geração de uma mistura homogênea dos reagentes em nível molecular. Ambos os processos são essenciais para que ocorra a reação, e qualquer um deles pode controlá-la. Desta forma, o processo mais lento entre a mistura e o mecanismo cinético é assumido como determinante da taxa de reação.

O processo de mistura dos reagentes da combustão é fortemente influenciado pela turbulência durante a alimentação de tais reagentes. A temperatura também exerce forte influência no processo de combustão e precisa ser levado em consideração na otimização deste processo.

O primeiro resultado publicado sobre a interação combustão e o tipo de escoamento (turbulento ou laminar) foi realizado por (DAMKOLER, 1947), em um estudo experimental com misturas ar/propano, onde seu propósito era verificar a influência da turbulência na propagação da chama. Para tal, o autor analisou a taxa de queima em função do número de Reynolds, onde constatou que a velocidade de queima aumentava com o incremento do número de Reynolds.

Assim, em combustões turbulentas, o tempo de mistura é dominado pelas propriedades dos turbilhões, e desta forma, a taxa de reação é proporcional ao tempo de mistura. Este conceito de controle de reação é aplicado em muitos processos de combustão industrial, onde a taxa de reação é mais rápida do que a taxa de mistura.

Neste contexto, existem basicamente dois tipos de sistema de combustão: *premixed flames* e *non-premixed flames*. No primeiro caso o combustível e o ar são misturados homogeneamente durante o processo, como nos casos dos motores de injeção. No segundo caso encontra-se uma situação de mistura heterogênea entre o combustível e o ar, onde encontramos regiões de misturas ricas em combustíveis e outras com mistura pobre ao longo da câmara de combustão. Nestes casos o progresso da combustão é controlado pela capacidade que o combustível apresenta de se misturar com o ar, ou seja, pela difusão do combustível no ar.

Um exemplo de um processo controlado pela capacidade de mistura do combustível com o ar é encontrado quando um combustível líquido na forma de *spray* é misturado com o ar na câmara de combustão, que é o caso do calcinador em estudo.

O processo de combustão em que a taxa é controlada pelo processo de mistura dos reagentes é descrita a partir do Modelo de Dissipação *Eddy* (*Eddy Brakc-up Model*), desenvolvido por (SPALDING, 1971); onde a taxa de consumo de combustível é especificada como uma função das propriedades de escoamento. Este modelo supõe que os reagentes, após se misturarem em nível molecular, formam os produtos instantaneamente, de maneira que a taxa de reação pode ser relacionada diretamente ao tempo necessário para misturar os reagentes em nível molecular.

2.4 Estudos realizados acerca de modelos baseados em CFD aplicados para simulação de sistemas de combustão.

Vários autores pesquisaram o tema combustão utilizando técnicas de fluidodinâmica computacional (CFD) para este fim. A seguir são demonstrados alguns exemplos de aplicação dessas técnicas, dando ênfase para o caso do

sistema de combustão turbulenta *non premixed flames*, por se tratar do tipo de sistema de combustão encontrado no calcinador em estudo. Tais autores chegaram a conclusões que podem ser levadas em consideração e testadas na análise dos efeitos do *design* do pré-aquecedor do calcinador no que diz respeito ao desenvolvimento de altas temperaturas na região da queima do combustível.

Zarnescu e Pisupati (2001) estudaram o efeito de mistura do combustível com o ar, na redução de emissão de NO_x em um sistema de combustão *non premixed flames*, utilizando o método CFD; e constatou que o processo de mistura é dominante em relação ao processo químico (cinético), de maneira que o uso de um modelo fluidodinâmico avançado associado a um modelo cinético simplificado era adequado para simulação. A mesma consideração foi aplicada para a simulação proposta para o pré-aquecimento do ar do calcinador estudado neste trabalho.

Segundo Zarnescu e Pisupati (2001) a aplicação de grande momento (quantidade de movimento) ao jato de combustível e ar, implica melhor penetração na zona primária, caracterizando intensa mistura com baixo tempo de residência, melhorando as condições de combustão e reduzindo emissões de NO_x .

Sabendo que a formação de NO_x acontece em temperaturas acima de 1800 K, as medidas sugeridas por estes autores para redução da formação de NO_x na zona primária, que coincide com a região do domo do calcinador em estudo neste trabalho, podem está relacionadas à redução de temperatura nesta região e, assim, pode ser um ponto de partida para análise do efeito das condições do *design* do sistema de combustão do calcinador em se tratando do excesso de temperatura encontrado na região do domo.

Zarnescu e Pisupati (2002), mais uma vez utilizaram o método CFD para uma aproximação integrada do *design* de um combustor, com o objetivo da máxima minimização de emissão de NO_x . O resultado da modelagem mostrou que melhores misturas e otimização do queimador, realmente contribuem significativamente para reduzir os níveis de NO_x na zona primária da combustão.

Baseado nos resultados encontrados por Zarnescu e Pisupati (2002), observa-se que a otimização da mistura e dispersão do jato de combustível com a injeção radial é significativamente melhor que a injeção axial para o jato de combustível,

fornecendo uma máxima penetração e, conseqüentemente, sendo considerada a melhor configuração.

Blanco *et. al.* (2006), também investigou o design de um combustor com a finalidade da otimização da redução das emissões de NO_x-CO, utilizando, para este fim, simulações através do método de fluidodinâmica computacional (CFD), onde incluiu condições de trabalho, simplificações necessárias e cabíveis, modelo geométrico, processo de refinação da malha, ajuste dos modelos físicos, condições de contorno, além da incorporação de algoritmos e funções definidas para o caso particular.

Em suas conclusões, Blanco (2006) alerta que quando a geometria na câmara de combustão não responde apropriadamente para uma combustão baseada nos turbilhões, pela injeção turbulenta do combustível, no que diz respeito à recirculação interna dos gases de combustão, pode causar um efeito oposto ao requerido e, assim, aumentar tanto as emissões como a temperatura de combustão. BLANCO, ainda evidencia a importância da otimização do processo, levando em conta outras variáveis, quando diz que alcançar temperaturas de combustão menores que 1800 K em qualquer equipamento de combustão, apesar de trazer algumas vantagens, significa promover combustão incompleta, aumentando emissão de CO, além de redução da capacidade do combustor.

Kim (2007) estudou um sistema de combustão que emprega a combustão turbulenta a partir de uma mistura prévia do combustível com o oxigênio (*premixed flames*), que vem ganhando bastante popularidade nas produções industriais de vidro, alumínio, ferro e aço, devido incluir, entre suas vantagens, alta eficiência de combustão, baixo volume na exaustão de gases, baixo consumo de combustível e baixa emissão de NO_x. Em relação a este tipo de sistema de combustão, KIM (2007) estudou as características da chama e encontrou que o comprimento da chama decresce com o aumento da velocidade do combustível ou do oxigênio (ar), devido à grande turbulência gerada pela entrada da mistura.

Shin (2009) realizou pesquisa acerca da estrutura da chama para o sistema de combustão turbulenta. Ele associa a distorção da chama obtida pelo escoamento turbulento devido à instabilidade de Kelvin-Helmoltz. Através de seu modelo, ele prevê a geração de vórtices e inclinação da direção da chama, como resultado da

velocidade tangencial do ar que atravessa a chama. Em seu trabalho, ele cita que Lee *et al* (2005) obteve a solução básica para chamas inclinadas, onde é demonstrado que o efeito da fluidodinâmica domina parâmetros como o aumento do ângulo de inclinação da chama.

Capítulo 3

3. MODELAGEM MATEMÁTICA

A resolução de qualquer problema físico requer a habilidade da criação do modelo matemático correspondente. Em relação à fluidodinâmica, três leis físicas fundamentais são a base para um modelo matemático que represente um fluido em movimento, conforme exposto no QUADRO 1.

QUADRO 1 - Fundamentos da Fluidodinâmica

Leis Básicas	Equações Fundamentais
Lei da Conservação de massa	Equação da continuidade
Segunda lei de Newton	Equação do Movimento
Primeira lei da Termodinâmica	Equação da Energia

Estas três leis básicas fundamentais podem ser trabalhadas através de balanços em volumes de controle infinitesimais, de forma a obter as respectivas equações de transporte. É a partir das equações de transporte que o *software* CFX obtém as equações médias temporais que são aplicadas a um volume de controle para resolver o modelo fluidodinâmico implementado.

3.1 Equações de Conservação

A Equação que representa a conservação da massa, também conhecida como Equação da continuidade, pode ser obtida analisando a taxa mássica de escoamento que entra e sai de um elemento infinitesimal de volume:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j) = 0 \quad (1)$$

Nesta Equação, U_j representa o vetor velocidade do escoamento, t é o tempo e ρ é a massa específica. Considerando um volume de controle infinitesimal, o acréscimo ou decréscimo temporal da massa específica neste volume é controlado pelo transporte convectivo de massa sobre as fronteiras deste volume de controle.

A Equação de transporte da quantidade de movimento ρU_i , pode ser formulada como segue:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho U_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_i U_j) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho f_i \quad (2)$$

Os três termos do lado direito da Equação 2 representam as forças, devido a pressão P , o tensor viscoso τ_{ij} , e as forças de campo f_i , respectivamente.

Além da massa e do movimento, a energia é a terceira propriedade do fluido para a qual uma Equação de conservação deve ser formulada de forma a descrever qualquer tipo de escoamento. A formulação apresentada aqui neste trabalho é em função da entalpia total H :

$$\frac{\partial(\rho H)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_j H)}{\partial x_j} = \frac{\partial P}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_j}(U_i \tau_{ij} + Q_j) + \rho U_i f_i \quad (3)$$

Considerando um volume de controle infinitesimal, os dois termos do lado esquerdo desta Equação descrevem a taxa de aumento de H e a taxa a qual esta grandeza é transportada por convecção nas fronteiras do volume de controle. O primeiro termo do lado direito da Equação 3 descreve a influência da pressão na entalpia total. O segundo termo descreve a taxa de trabalho realizado pelo fluido contra a sua tensão viscosa produzida por deformação. O gradiente Q_j é o fluxo de energia transferido por condução no volume de controle e o último termo refere-se ao trabalho realizado por forças de campo.

É importante destacar que o modelo matemático resultante das equações de transporte expostas deve ser tal que possa ser resolvido com tempos de computação

não-proibitivos e que os resultados obtidos representem o fenômeno físico em questão. Entretanto, resolver as equações de transporte, na forma em que foram apresentadas até aqui, é próximo do impraticável pelo simples fato da tecnologia atual não resolvê-las com precisão e tempo computacional satisfatórios. Assim, geralmente é introduzido o conceito de decomposição em propriedades médias, sendo mais comum o procedimento convencional de médias temporais (*Reynolds Average*).

3.2 Formulações das Equações Médias Temporais

De forma a obter a formulação média da Equação 1 da continuidade, deriva-se a mesma, introduzindo o conceito de médias temporais, resultando na seguinte relação:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{U}_j) = 0 \quad (4)$$

Aplicando a média temporal na Equação fundamental 2, obtém-se a Equação 5:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{U}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{U}_i \bar{U}_j) = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\tau}_{ij} + \rho \overline{u_i u_j}) \quad (5)$$

Na derivação das equações médias, as forças de campo são negligenciadas. Assim para um fluido newtoniano hipotético, o tensor tensão é dado por:

$$\tau_{ij} = -\mu_b \delta_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_i} - \mu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad (6)$$

em que $\mu_b = \frac{2}{3} \mu$ é a viscosidade *bulk*, μ é a viscosidade molecular e δ_{ij} representa o delta de Kronecker ($\delta_{ij} = 1$ para $i = j$ e $\delta_{ij} = 0$ para $i \neq j$).

Assim, quando se aplica a média na Equação 2, nove termos surgem como resultado desta operação matemática. Fisicamente são nove tensores extras onde três destes são tensores normais e os seis demais são tensores de cisalhamento.

Estes tensores extras são conhecidos como tensores tensão de Reynolds e apresentam o seguinte equacionamento:

$$\tau_{ij} = -\rho \overline{u_i u_j} \quad (7)$$

Quanto à média da tensão viscosa $\overline{\tau_{ij}}$, presente na Equação 5, tem-se a Equação 8:

$$\overline{\tau_{ij}} = -\mu \left(\frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U}_j}{\partial x_i} \right) \quad (8)$$

Com relação a equação da conservação de energia, a entalpia total esta relacionada a energia total, E , a energia interna, e , a entalpia estática, H , da seguinte maneira:

$$H = E + \frac{P}{\rho} = e + \frac{1}{2} U_i U_i + \frac{P}{\rho} \quad (9)$$

Onde:

$$H = h + \frac{1}{2} U_i U_i \quad (10)$$

Para derivação futura das equações de transporte para fluxos turbulentos de calor, é interessante expressar a Equação de energia em termos da entalpia estática:

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} = \frac{\partial(\rho U_j h)}{\partial x_j} + \frac{\partial P}{\partial t} + U_j \frac{\partial P}{\partial x_j} - \tau_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial Q_j}{\partial x_j} \quad (11)$$

Aplicando a Lei de Fourier, o fluxo de calor Q_j no lado direito das Equações 3 e 11 é dado por:

$$Q_j = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \quad (12)$$

em que λ é a condutividade térmica.

Uma relação deve ser encontrada, de forma que a entalpia relacione-se com a temperatura. Assim, para um gás ideal, h é diretamente relacionado com T através do calor específico à pressão constante, C_p :

$$h = C_p T \quad (13)$$

Se a razão entre a variação da pressão e a pressão absoluta é pequena comparada com a razão entre a variação da temperatura e a temperatura absoluta, a lei dos gases ideais $P = \rho RT$, mostra que o efeito da mudança da pressão na temperatura é pequeno. Isto acontece em escoamentos incompressíveis e compressíveis a velocidades não muito altas. Ainda nestes casos, a Dissipação será muito pequena (CEBECI e SMITH, 1974). Portanto, os termos relacionados à Dissipação e a pressão nas Equações 3 e 11 podem ser negligenciados, levando a formulação da Equação da energia para energia total e entalpia estática, sendo respectivamente:

$$\frac{\partial(\rho H)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j H) - \frac{\partial Q_j}{\partial x_j} \quad (14)$$

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j h) - \frac{\partial Q_j}{\partial x_j} \quad (15)$$

A média temporal da Equação da energia, representada pelas Equações 14 e 15, resultam nas seguintes equações de conservação para a energia média total (Equação 16) e para a entalpia estática (Equação 17):

$$\frac{\partial(\rho \bar{H})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \bar{U}_j \bar{H}) = -\frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{Q}_j + \rho \bar{u}_j'' \bar{H}'') \quad (16)$$

$$\frac{\partial(\rho \bar{h})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \bar{U}_j \bar{h}) = -\frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{Q}_j + \rho \bar{u}_j'' \bar{h}'') \quad (17)$$

onde a média e as flutuações da energia total, \bar{H} e H'' , são definidas como:

$$\bar{H} = \bar{h} + \frac{\overline{U_i U_i}}{2} = \bar{h} + \frac{\overline{U_i U_i}}{2} + \frac{\overline{u_i'' u_i''}}{2} = \bar{h} + \frac{\overline{U_i U_i}}{2} + k \quad (18)$$

$$H'' = h'' + \overline{U_i u_i''} + \frac{\overline{u_i'' u_i''}}{2} - k \quad (19)$$

Onde $k = \frac{\overline{u_i'' u_i''}}{2}$ representa a energia cinética turbulenta.

3.3 Conservação das espécies química

As espécies químicas podem aparecer ou desaparecer como fruto de uma possível reação química.

A Equação 20 da conservação das espécies C pode ser derivada, na sua forma instantânea, como segue:

$$\frac{\partial \rho C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j C) = \frac{\partial J_i}{\partial x_j} + S \quad (20)$$

Onde: ρ é a massa específica, C é a espécie transportada, U_j é o vetor velocidade, J é o termo difusivo e S é o termo fonte/sumidouro do transporte das espécies devido a reações químicas. Nesta Equação 20 o primeiro termo do lado esquerdo contabiliza o acúmulo de material dentro do volume de controle, enquanto que o segundo termo representa o transporte convectivo deste material sobre a superfície de controle. No lado direito desta Equação, o primeiro termo diz respeito ao termo difusivo dentro do próprio volume e o último termo é referente a taxa de reação química caso houver.

O termo difusivo J_i da Equação 20 pode ser relacionado através da Equação 21 da segunda Lei de Fick:

$$J_i = -\Gamma \frac{\partial C}{\partial x_j} \quad (21)$$

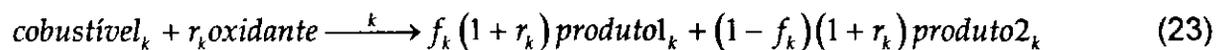
Onde: Γ representa o coeficiente de difusão.

O termo convectivo não-linear $\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j C)$ presente no lado esquerdo da Equação 20 gera um termo de fluxo turbulento desconhecido (chamado de *Fluxo de Reynolds*) quando se aplica a média temporal, dando origem a Equação 22:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{C}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \overline{C U_j}) = -\frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{J}_j + \rho \overline{c' u_j'}) + \bar{S} \quad (22)$$

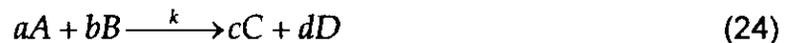
3.4 Combustão Turbulenta

Da maneira como esta implementado o modelo, um processo de combustão pode ser descrito genericamente utilizando uma simples reação, conforme a Equação 23:



onde r_k é a fração mássica estequiométrica da k-ésima reação e f_k é a fração mássica do primeiro produto formado na reação.

Por exemplo, considere a reação genérica representada pela Equação 24:



Para esta reação considerada, tem-se:

$$f_k = \frac{c \cdot PM_C}{c \cdot PM_C + d \cdot PM_D} \quad (25)$$

e

$$r_k = \frac{b \cdot PM_B}{a \cdot PM_A} \quad (26)$$

em que PM_i é o peso molecular da espécie i .

Para contar com os efeitos térmicos da reação, um termo de calor de reação deve ser adicionado à Equação da energia. Há também a necessidade de adicionar um termo fonte, S_E , e outro relativo às difusividades das espécies químicas

presentes. A Equação em questão está em sua forma final, como mostra a Equação 27:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H) - \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j H) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_i^n \Gamma_i h_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} + \frac{\mu_i}{Pr} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + S_E - \sum_i^n h_i^f R_i \quad (27)$$

onde o termo $\sum_i^n h_i^f R_i$ refere-se à contribuição provinda da reação química e h_i^f é a entalpia de formação da espécie química i . Este termo transforma a energia de conversões químicas em calor sensível, enquanto que o termo $\sum_i^n \Gamma_i h_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_j}$ refere-se à contribuição difusiva das espécies químicas.

Em se tratando de uma combustão turbulenta, o modelo supõe que a taxa de reação pode ser relacionada diretamente ao tempo necessário para misturar os reagentes a nível molecular. O tempo de mistura, em escoamentos turbulentos, é dominado pelas propriedades de turbilhões, e desta forma, a taxa de reação é proporcional ao tempo de mistura, que por sua vez, é definido pela energia cinética turbulenta, k , e por sua Dissipação, ε .

Em termos matemáticos, a taxa de reação controlada pelo processo de mistura é expressa em termos da escala de tempo turbulento, $\frac{k}{\varepsilon}$, onde k é a energia cinética turbulenta e ε é a taxa de Dissipação de k . O modelo leva em conta a taxa de Dissipação do combustível, do oxidante e dos produtos, de acordo com as Equações 28, 29 e 30, respectivamente:

$$R_{comb,edm} = -C_{R\rho} Y_{comb} \frac{\varepsilon}{k} \quad (28)$$

$$R_{oxid,edm} = -C_{R\rho} \frac{Y_{oxid}}{r_k} \frac{\varepsilon}{k} \quad (29)$$

$$R_{prod,edm} = -C'_{R\rho} \frac{Y_{prod}}{(1+r_k)} \frac{\varepsilon}{k} \quad (30)$$

onde $R_{i,edm}$ é a taxa de reação do componente i pelo modelo de mistura (*Eddy Dissipation Model*), sendo $i = comb$ para combustível, $i = oxid$ para o oxidante e $i = prod$ para o produto da reação de combustão. Y_{comb} , Y_{oxid} e Y_{prod} são referentes às frações mássicas do combustível, oxidante e produto respectivamente e C_R e C'_R são constantes do modelo.

Em seguida calcula-se a taxa de reação, que é considerada como sendo a menor das taxas dissipativas turbulentas entre a do combustível, do oxidante e do produto, conforme mostra a Equação 31:

$$R_{comb,edm} = -\rho \frac{\varepsilon}{k} \min \left[C_R Y_{comb}, C_R \frac{Y_{oxid}}{r_k}, C'_R \frac{Y_{prod}}{(1+r_k)} \right] \quad (31)$$

Capítulo 4

4. MÉTODO NUMÉRICO

Em escoamento de fluidos é muito importante satisfazer os princípios de conservação em nível discreto. Soluções analíticas para estas equações existem apenas para os mais simples casos de fluido em movimento e sob condições ideais. Para obter soluções para casos reais de escoamento, uma aproximação numérica deve ser adotada de maneira que as equações sejam substituídas por aproximações algébricas que podem ser resolvidas usando um método numérico.

Em literaturas como (MALISKA, 2004, PATANKAR, 1980 e VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995) encontram-se, de forma didática e clara, os princípios nos quais os métodos numéricos se baseiam. Os autores abordam tópicos como a discretização numérica e conseqüente obtenção das equações linearizadas e métodos para resolução das equações resultantes.

No caso do método dos volumes finitos, em especial, ocorre a discretização do domínio espacial, utilizando malhas tridimensionais. A malha é usada para construir volumes finitos, que são usados para conservar quantidades relevantes, tal como massa, momento e energia.

De forma ilustrativa, e para efeito de simplificação do entendimento, uma malha bidimensional típica é mostrada na FIG. 4. Todas as variáveis da solução e propriedades do fluido são armazenadas nos nós (vértices da malha). Um volume de controle (área hachurada) é construído ao redor de cada nó da malha usando as medianas (linhas definidas pela ligação do centro da aresta e o centro do elemento em volta do nó).

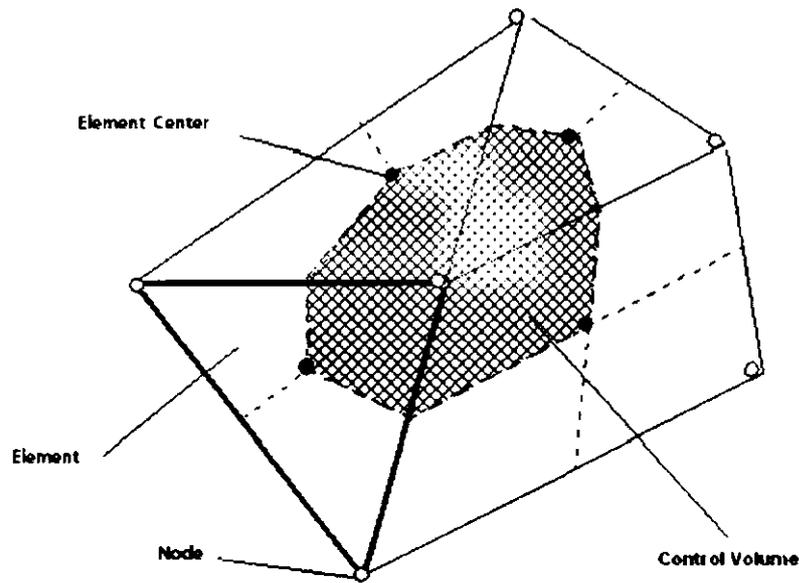


FIGURA 4 - Malha bidimensional (definições do volume de controle)

Assim, no método dos volumes finitos, as equações aproximadas são obtidas através de balanços de conservação em volumes elementares de controle.

Dada às considerações anteriormente discutidas no tratante a modelagem do fenômeno do escoamento de um fluido, o problema fluidodinâmico pode ser representado pelas seguintes equações de conservação da massa, movimento e escalar (aplicado para o caso da energia):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j) = 0 \quad (32)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho U_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \mu U_j) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{ef} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \right) + S_{u_i} \quad (33)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \mu \phi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\Gamma_{ef} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) + S_{\phi} \quad (34)$$

em que ρ é a massa específica do fluido, t é o tempo, U_i e U_j são os vetores velocidade, x_j é a componente espacial em coordenadas cartesianas, P é a

pressão, μ_{ef} é a viscosidade efetiva do fluido, ϕ é um escalar qualquer, Γ_{ef} é a difusividade efetiva do escalar e S é o termo fonte.

Através da técnica dos volumes finitos (também denominado como método dos volumes de controle) é possível integrar essas equações sobre um volume de controle fixo no espaço. Assim, utilizando o teorema de divergência de Gauss e integrando as equações supracitadas, obtêm-se as Equações 35, 36 e 37 para conservação da massa, movimento e escalar, respectivamente.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_v \rho dv + \int_s \rho U_j dn_j = 0 \quad (35)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_v \rho U_i dv + \int_s \rho U_j U_i dn_j = - \int_s P dn_j + \int_s \mu_{eff} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) dn_j + \int_v S_{U_i} dv \quad (36)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_v \rho \phi dv + \int_s \rho U_j \phi dn_j = \int_s \Gamma_{eff} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) dn_j + \int_v S_\phi dv \quad (37)$$

onde v e S simbolizam integrais de volume e de superfície, respectivamente, e dn_j são as componentes cartesianas diferenciais do vetor normal externo à superfície. As integrais de superfície são integrações do fluxo, enquanto que as integrais de volume representam termos fontes ou de acúmulo.

Assim, no método dos volumes de controle, o domínio computacional é discretizado em elementos de fluxo e as superfícies destes volumes de controle são definidos pelos planos medianos de cada elemento. Esta abordagem tem sido utilizada por vários pesquisadores da área, tais como (RONEL e BALIGA, 1979, SCHNEIDER e RAW, 1986 e SCHNEIDER e RAW, 1987).

Desta forma, as equações integradas, Equações 35, 36, 37 são aplicadas para cada volume de controle discretizado pela técnica dos elementos de fluxo. As integrais de volume são diretamente convertidas na forma discreta e são avaliadas no volume de controle como um todo. As integrais de superfície são avaliadas nos pontos de integração, p.i. para a completa conservação das equações contínuas

dentro da sua forma discretizada. Os locais destes p.i. para um elemento de fluxo são apresentados na FIG.5 para um elemento bidimensional quadrilátero.

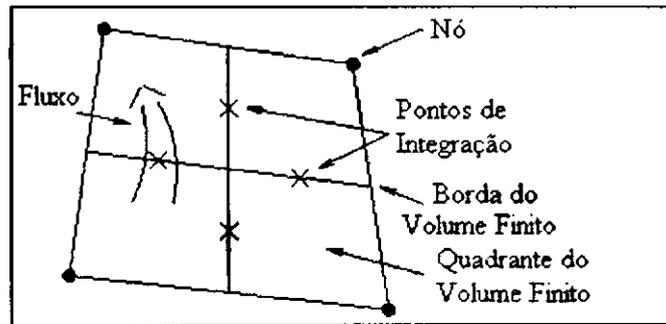


FIGURA 5 - Definição dos pontos de integração para um elemento 2-D quadrilátero

A forma discretizada das equações integrais de massa, movimento e escalares (esta Equação também representa a Equação da energia) são então escritas como:

$$\rho V \left(\frac{\rho - \rho^o}{\Delta t} \right) + \sum_{p.i.} \left(\rho U_j \Delta n_j \right)_{p.i} = 0 \quad (38)$$

$$\begin{aligned} \rho V \left(\frac{U - U_i^o}{\Delta t} \right) + \sum_{p.i.} \left(\rho U_j \right)_{p.i} = \sum_{p.i.} \left(P \Delta n_i \right)_{p.i} \\ + \sum_{p.i.} \left(\mu_{ef} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \Delta n_j \right)_{p.i} + \bar{S}_{U_i} V \end{aligned} \quad (39)$$

$$\rho V \left(\frac{\phi - \phi_i^o}{\Delta t} \right) + \sum_{p.i.} \left(\rho U_j \phi \right)_{p.i} = \sum_{p.i.} \left(\Gamma_{eff} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \Delta n_j \right)_{p.i} + \bar{S}_{\phi_i} V \quad (40)$$

onde V é o volume de controle, o subscripto $p.i.$ corresponde a ponto de integração, Δn_j representa o vetor unitário externo à superfície, Δt é o passo de tempo, o superescrito "o" refere-se ao passo de tempo anterior. O escoamento mássico representado por ρU_j através da superfície presente nas equações é dado por:

$$\rho U_j = \left(\rho U_j \Delta n_j \right)_{p.i}^o \quad (41)$$

Diante de sua característica conservativa, o método dos volumes finitos é adequado para resolver problemas de fluidodinâmica de forma robusta, uma vez que não existe a possibilidade da existência de gerações/sumidouros de quantidades, de massa, quantidade de movimento e energia, no interior do domínio de cálculo, mesmo utilizando malhas grosseiras. Por esta razão, trata-se do método empregado na maioria dos pacotes comerciais com penetração industrial. (MALISKA, 2004).

Além disso, desde que os sistemas coordenados ortogonais convencionais começaram a ceder espaço para os sistemas coordenados generalizados coincidentes com a fronteira do domínio, o método dos volumes finitos passou a resolver problemas em geometrias irregulares. Como consequência, atualmente, um grande esforço de pesquisa está sendo dedicado ao desenvolvimento de métodos em volumes finitos usando malhas não-estruturadas. (MALISKA, 2004).

Capítulo 5

5. FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

O método CFD, do inglês *Computational Fluid Dynamics*, faz uso de ferramenta computacional para simulação de escoamento de fluidos através do desenvolvimento interativo de modelos fluidodinâmicos, além de obtenção e visualização 3D dos resultados.

A simulação CFD é dividida em quatro etapas:

- 1) Criar a geometria/malha
- 2) Definir as propriedades físicas dos fluidos e condições de contorno do sistema
- 3) Resolver o problema CFD
- 4) Visualizar os resultados

As etapas 1 e 2 fazem parte dos estágios de pré-processamento. A etapa 3 diz respeito ao “solver”, sendo a etapa de processamento dos resultados. A última etapa faz parte do estágio de pós-processamento.

Na primeira etapa, o objetivo é produzir a malha em que será resolvido, através de método numérico, o modelo fluidodinâmico proposto. A malha só pode ser criada depois de dispor da geometria do sistema na forma de um sólido fechado, que pode ser criado no CFX ou importado de algum pacote CAD. A malha de controle é gerada automaticamente, ajustando-se as propriedades da malha da forma mais conveniente.

A segunda etapa trata-se de um processo interativo utilizado para estabelecer as condições físicas que o “solver” necessita para resolver o problema. Os resultados são gerados pelo “solver”, na terceira etapa do processo, de forma não interativa.

No “solver”, as equações diferenciais parciais são integradas sobre todo o volume de controle na região de interesse; o que é equivalente a aplicar as leis de conservação básicas para cada volume de controle. Essas equações integrais são convertidas para um sistema de equações algébrico aproximadas, como

demonstrado no capítulo anterior. Por fim as equações algébricas são resolvidas iterativamente pelo método numérico dos volumes finitos. Quando a solução numérica se aproxima da solução exata, diz-se que a solução convergiu. Daí, o “solver” produz um arquivo com o resultado que é então transferido para o pós-processador.

A última etapa consiste de um processo interativo usado para analisar, visualizar e apresentar os resultados em um pós-processador. Os resultados contêm variações de velocidade, pressão, temperatura, concentração de determinado componente, entre muitas outras propriedades em torno da região de interesse. A visualização dos resultados permite melhorar o entendimento do engenheiro acerca do comportamento do fluido em torno da região de interesse, o que pode conduzir, por exemplo, a modificações de projeto, que pode ser testada, alterando a geometria do modelo CFD e visualizando o efeito.

5.1 Aplicação da técnica CFD na simulação do pré-aquecedor

A modelagem do pré-aquecedor do calcinador em estudo neste trabalho foi desenvolvida usando o aplicativo CFX da ANSYS, através de técnicas de fluidodinâmica computacional.

A geometria do equipamento bem como as condições operacionais adotados na simulação foram baseadas em dados técnicos encontrados em aplicações reais. Na TAB. 2, são demonstrados as condições operacionais encontradas em aplicações industriais.

TABELA 2 - Condições Operacionais encontradas na Indústria

	Temperatura C	Pressão kPa	Fluxo
Óleo	150	750	1,9 t/h
Vapor		500	
Ar queimador	130		2600 Nm ³ /h
Ar lateral	130		4000 Nm ³ /h
Ar principal	539		97000 Nm ³ /h

A alimentação de óleo, a qual se refere a TAB. 2, é a alimentação de óleo BPF (uma mistura não definida de hidrocarbonetos pesados). Conforme visto nesta mesma figura, na entrada do combustível, também é alimentado vapor. Este é necessário para atomizar (pulverizar) a alimentação do combustível, que se encontra na fase líquida, formando um jato de gotículas do combustível, promovendo maior área disponível para reação com o oxigênio presente na alimentação do ar.

A atomização é uma etapa de grande importância, e uma boa atomização é essencial para o processo de combustão. A atomização é fortemente influenciada pela geometria e diâmetro do atomizador, assim como pelas propriedades do líquido, do fluido de atomização e velocidade relativa dos mesmos, assim como pelas condições (temperatura, umidade, entre outros) do meio circundante. O atomizador que nos referimos é o próprio queimador.

Para efeito de simulação, foram realizados os seguintes ajustes:

1) O CH₄ foi admitido como sendo o combustível

Para uma simulação mais realística, o conhecimentos de propriedades importantes para a implementação de um modelo de combustão se faz necessário. Assim, em substituição ao óleo BPF, o metano (CH₄) foi adotado como combustível na simulação, já que todas as propriedades necessárias deste material estão disponíveis no próprio banco de dados do CFX.

No entanto, para que se garantisse o mesmo fornecimento de energia para o pré-aquecimento do ar, que se teria com a queima do óleo BPF, a vazão de alimentação de metano foi ajustada de forma a manter a taxa de geração de energia

inalterada. Para isso foi levado em consideração a relação de poder calorífico de ambos os combustíveis. A demonstração do cálculo feito pode ser visto Apêndice A.

2) O diâmetro da entrada de combustível foi alterado.

Como o CH₄ (metano) se encontra na fase gasosa, o combustível, que entra completamente vaporizado, não necessita de uma alimentação de vapor de água para atomização do líquido. Além disso, sendo um gás, a distância da chama à cabeça do queimador é diferente da encontrada quando tratamos com combustíveis líquidos atomizados. Para que promovêssemos uma boa penetração da chama, utilizando o metano como combustível, foi alterado o diâmetro da entrada do combustível, respeitando limites de viabilidade operacional, já que o diâmetro da alimentação altera a pressão de entrada e conseqüentemente a velocidade da alimentação, alterando características fluidodinâmicas. A expectativa foi de aproximar os resultados encontrados para o gás, daqueles esperados para o líquido atomizado. Considerações a este respeito são discutidas no Apêndice B.

3) A reação de combustão foi simulada usando o *Eddy Dissipation Model*

A partir deste modelo, foi considerado que a taxa de reação química é rápida em relação ao processo de transporte no escoamento, não exigindo controle cinético do processo reacional. Assim, entende-se que o processo de mistura do combustível com o oxidante limita a velocidade da combustão.

4) A combustão foi considerada completa

A reação considerada especificou a combustão completa em seus produtos em etapa única, incluindo formação de NO, proveniente da oxidação do nitrogênio presente no ar em proporções encontradas na atmosfera.

5) O efeito da transferência de calor por radiação foi incluído usando o modelo P1 disponível no CFX.

Tal modelo é uma simplificação da equação de transporte da radiação, que supõe que a intensidade da radiação é isotrópica, ou seja, o sentido independente de uma dada posição no espaço (RAITHBY, 1991). Ajustadas as propriedades de

radiação, diminui-se significativamente o tempo de solução, visto que o CFX-solver passa a não ter que calcular propriedades de radiação da mistura.

A validação do modelo desenvolvido foi realizada a partir da comparação entre os resultados fornecidos pelo modelo desenvolvido e os fornecidos pela empresa, principalmente com relação ao local da falha prematura do refratário do pré-aquecedor.

Capítulo 6

6. RESULTADOS

6.1 Geometria e malha do pré-aquecedor

A FIG. 6 apresenta a geometria do pré-aquecedor com as indicações das entradas de ar e combustível neste vaso.

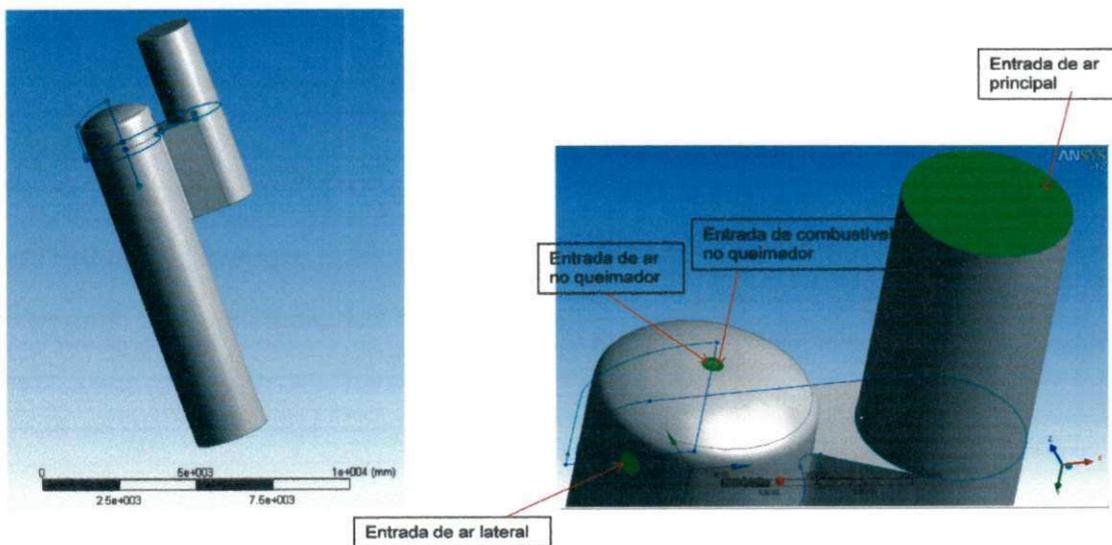


FIGURA 6 - Geometria do pré-aquecedor (detalhe das entradas de combustível e ar)

As medidas impostas a essa geometria, bem como a posição das alimentações de ar e combustível, estão de acordo com o que se encontra na aplicação industrial, disponibilizada a partir de desenhos técnicos. Assim, o modelo colabora para um resultado mais próximo do fiel em relação a fluidodinâmica do ar que passa pelo pré-aquecedor.

Na FIG. 7 vê-se a malha utilizada na simulação. Tal malha tem aproximadamente 250 mil elementos.

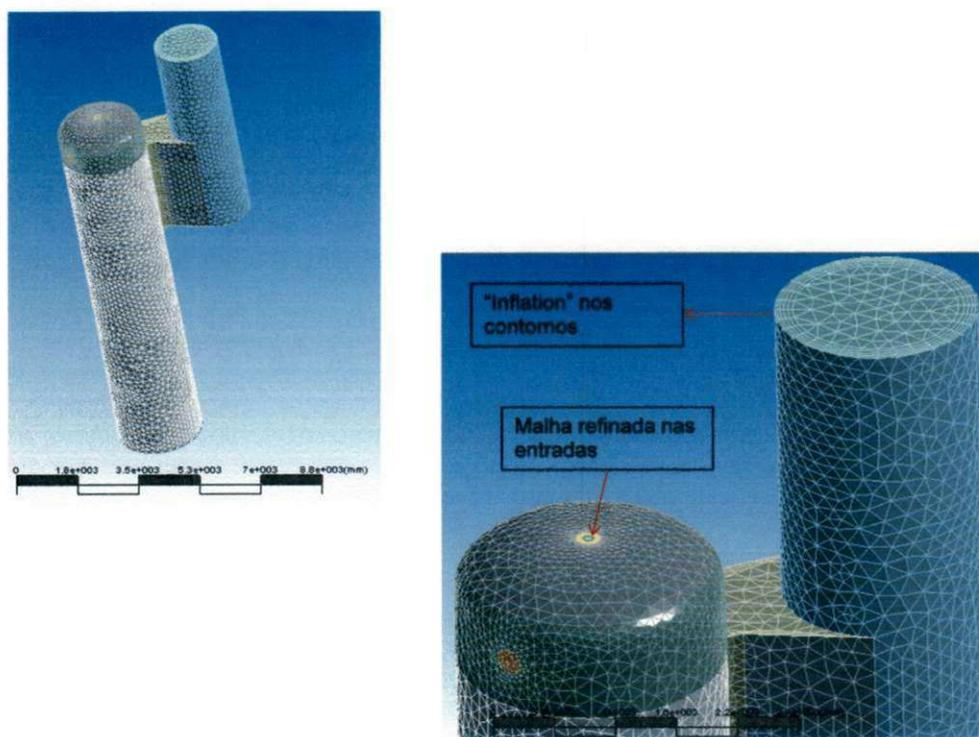


FIGURA 7 - Malha utilizada na simulação (em destaque: detalhes da malha produzida)

Trata-se de uma malha não estruturada. Para fornecer resultados mais precisos foi dado um refinamento maior na entrada do ar e do combustível a partir do queimador. Ainda em busca de maior qualidade dos resultados foi colocado *inflation* nos contornos do equipamento, que nada mais é que aproximar a malha para uma condição estruturada próximo às paredes, de forma a aproximar com maior fidelidade as condições de contorno nessa região.

6.2 Visualização dos Resultados

A FIG. 8 mostra o perfil de temperatura ao longo do pré-aquecedor através de um plano axial, perpendicular ao eixo z da geometria doo vaso.

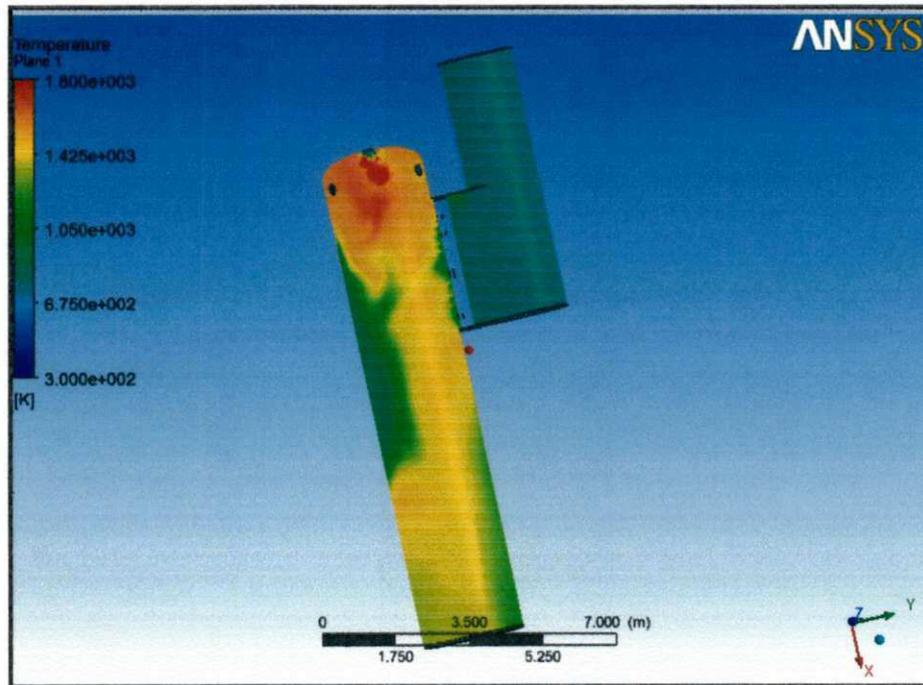


FIGURA 8 - Perfil de temperatura no plano axial (XY) do pré-aquecedor

Percebe-se que em um primeiro momento o *spray* do combustível, simulado como sendo o gás CH_4 , arrasta o ar primário em uma alta pressão para o interior da câmara de combustão, para, assim, iniciar a combustão, através de um difusor que chamaremos de queimador.

Logo na saída do queimador, o combustível e o oxigênio presente no ar estão completamente separados, o que percebe-se ao observar que ainda não há geração de energia proveniente da reação de combustão, já que a temperatura na saída do queimador apresenta valores equivalentes à temperatura de alimentação destas espécies no mesmo. Esse resultado é coerente com o tipo de sistema de combustão *nonpremixed flames*, já que a mistura dos reagentes acontecerá só após a alimentação e dependerá da turbulência empregada no processo. Contrário ao que ocorre nos

sistema *premixed flames*, quando os reagentes são alimentados misturados de forma homogênea e a taxa de combustão é controlada apenas pela cinética da reação.

Após a alimentação do combustível e do ar, estes são misturados através da difusão do oxigênio, presente no ar, para o interior do jato de combustível devido à turbulência acarretado pelo arraste do oxigênio, donde percebemos um aumento significativo de temperatura, o que indica que a reação está acontecendo, liberando a energia necessária para o pré-aquecimento do ar.

Para completar o processo, ar secundário, proveniente da alimentação lateral, é utilizado para que, além de promover uma maior recirculação do ar, o que se faz necessário para aumentar o tempo de contato das espécies, e, conseqüentemente, favorecer uma boa mistura sem ter que aumentar demasiadamente o vaso, também colabore no resfriamento dessa mistura, de modo a evitar o desgaste pré-maturo do refratário na região do “domo”, visto que nessa região é onde encontramos as temperaturas mais altas.

Conforme podemos observar, antes da entrada do ar secundário, próximo a saída do queimador, a temperatura é aumentada para valores superiores a 1800 K. Esse resultado é coerente com a temperatura na qual o NO é formado, conforme pode ser verificado em *handbooks*. O perfil de concentração de NO no pré-aquecedor é demonstrado na FIG. 9. O gás que sai dessa zona é então diluído com o ar secundário, que por sua vez induz uma maior turbulência e fornece mais oxigênio para completar a combustão da mistura inicialmente muito rica em combustível. Nesse estágio observamos que a temperatura baixa para valores inferiores a 1800 K, reduzindo a quantidade de NO produzida. Posteriormente, os gases de combustão entram em uma zona de diluição com o ar da alimentação principal, e sua temperatura é reduzida para uma faixa aproximada entre 1000K e 1400K, até que na saída do pré-aquecedor o ar está a uma temperatura aproximada a 1250K.

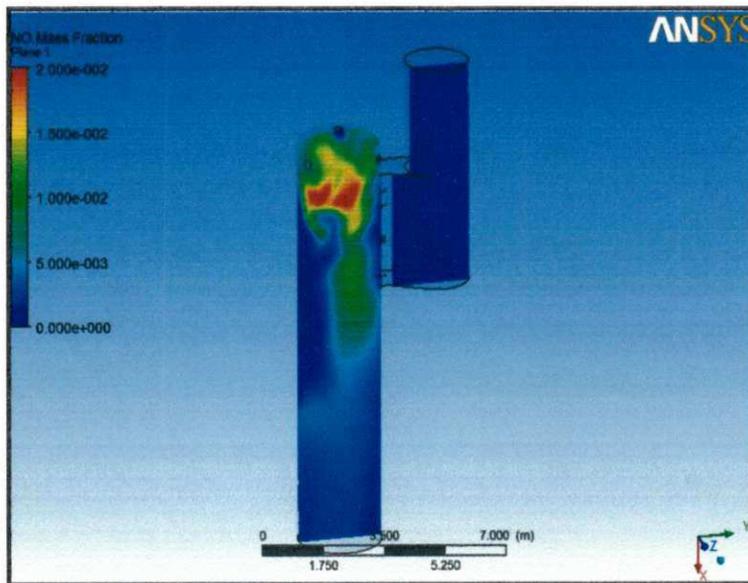


FIGURA 9 - Perfil de concentração de NO no plano axial (XY) do pré-aquecedor

A FIG. 10 demonstra o perfil de concentração de O_2 ao longo do pré-aquecedor. Através desse gráfico é possível tirar algumas conclusões em relação à mistura dos reagentes.

Podemos perceber que existe uma relação direta entre o perfil de temperatura e a mistura promovida entre o ar e o combustível no pré-aquecedor, visto que as zonas em que observamos as menores temperaturas, coincidem com as regiões em que o oxigênio não se misturou com o combustível, evidenciado pela fração mássica de oxigênio observada, que é a mesma encontrada na atmosfera (0,232). Nesses pontos não houve geração de energia proveniente da reação de combustão, permanecendo o oxigênio em proporções inalteradas em relação à sua alimentação. Do contrário, quando não percebemos concentração apreciável de oxigênio, indicando que este foi consumido na reação de combustão, temos a dissipação de calor proveniente da reação exotérmica, que faz aumentar a temperatura.

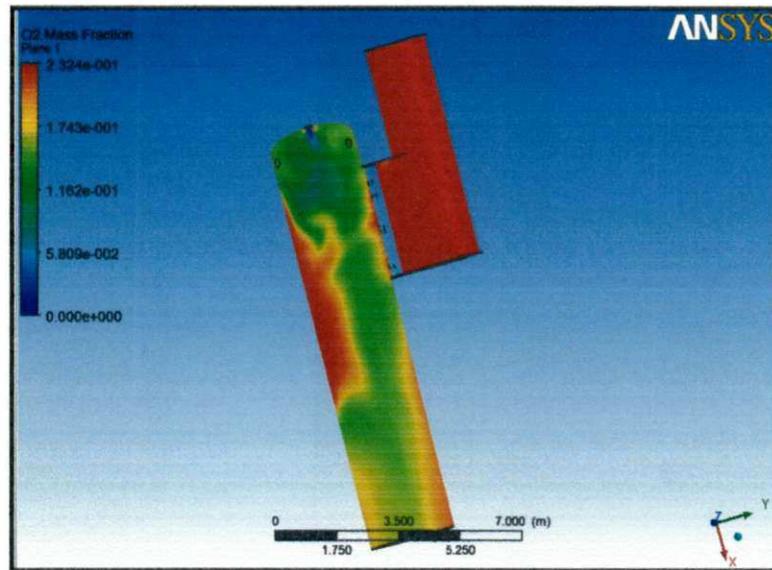


FIGURA 10 - Perfil de concentração de O_2 no plano axial (XY) do pré-aquecedor

Perfil de

Estes efeitos na mistura das espécies podem ser explicados pela fluidodinâmica do ar, através dos vetores velocidade. Os vetores velocidade indicam além da velocidade de escoamento, a direção e o sentido do fluxo de ar. A FIG. 11 demonstra o perfil dos vetores velocidade ao longo de um plano do pré-aquecedor.

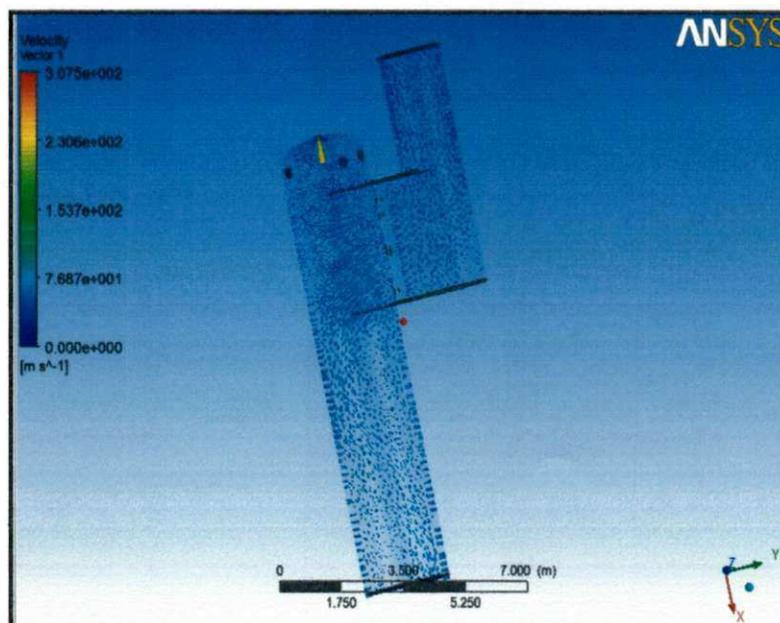


FIGURA 11 – Vetores velocidade do fluxo de ar ao longo do plano (axial) XY do pré-aquecedor.

Diante da visualização dos vetores velocidade é possível identificar redemoinhos, zonas mortas e caminhos preferenciais, ao longo do pré-aquecedor, o que justifica uma mistura mais rica ou mais pobre entre o combustível e o ar, e, conseqüentemente, uma maior ou menor geração de energia em determinadas regiões.

A FIG. 12 demonstra que as regiões em que ocorrem os redemoinhos coincidem com as regiões em que as temperaturas são mais altas, pois fica evidente que neste ponto promoveu-se uma melhor mistura entre o ar e o combustível, favorecendo a reação de combustão que liberou a energia necessária para o aumento da temperatura.

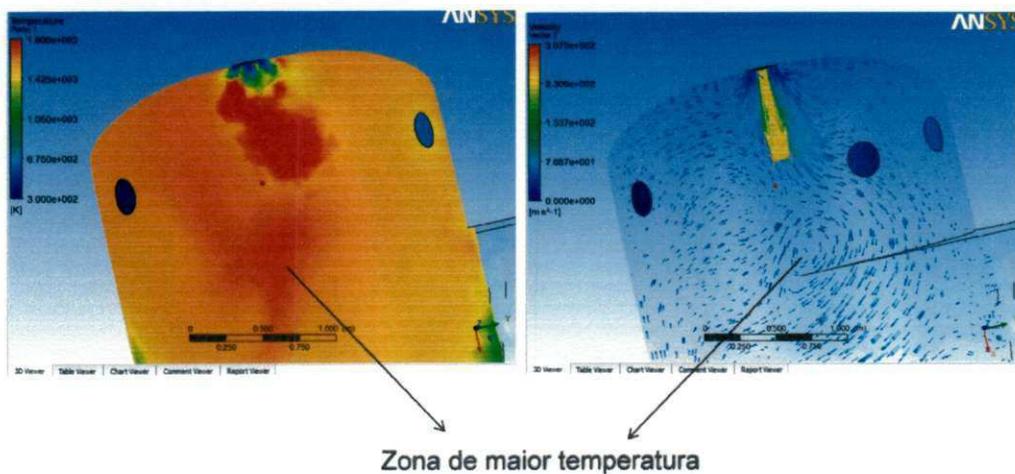


FIGURA 12 - Detalhe dos vetores velocidade na região de maior temperatura

A FIG. 13 mostra o perfil de temperatura e as linhas de corrente em um plano radial que corta as entradas do ar secundário no pré-aquecedor. Percebe-se que, devido à posição da alimentação do ar secundário, promove-se um redemoinho deslocado do centro da circunferência obtida pelo corte dado. Assim, como antes previsto, vemos que nessa região encontramos uma maior concentração de energia, proporcionando maior temperatura.

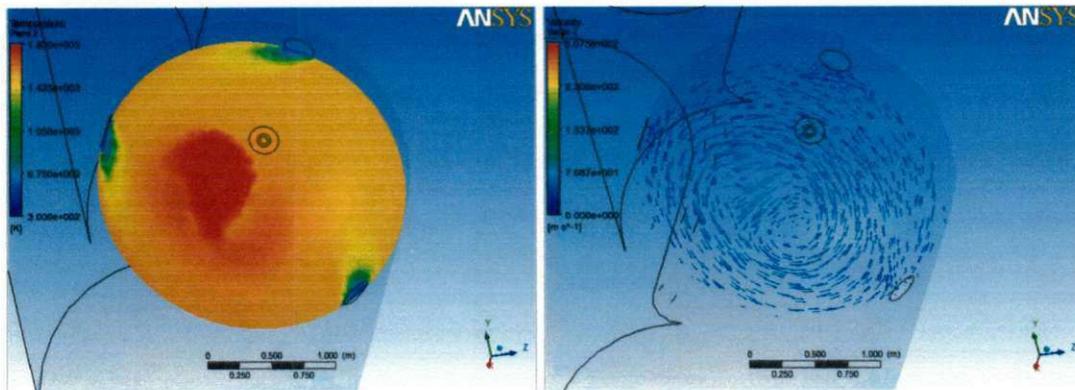


FIGURA 13 - Perfil de temperatura e vetores velocidade no plano radial (YZ) que corta as entradas do ar secundário

A FIG. 14 mostra que o redemoinho desloca-se em direção à parede do pré-aquecedor, fazendo com que altas temperaturas possam ser encontradas próximo a parede externa deste equipamento, o que potencializa o desgaste pré-maturo do refratário.

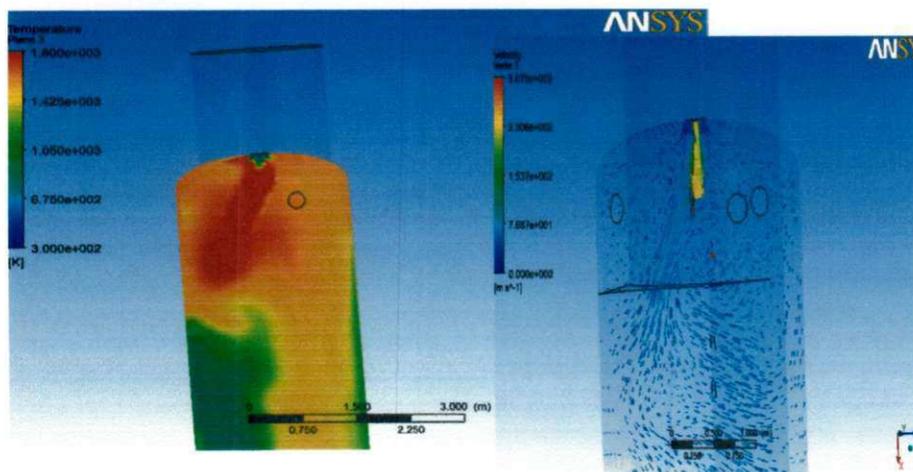


FIGURA 14 - Perfil de temperatura e vetores velocidade ao longo do plano axial (XZ) do pré-aquecedor

Esse resultado pode ser confirmado através da visualização do perfil de temperatura ao longo dos contornos do pré-aquecedor, conforme FIG. 15, que mostra

uma maior concentração de energia em um dos lados do pré-aquecedor, em relação ao seu lado oposto.



FIGURA 15 - Perfil de temperatura ao longo dos contornos no pré-aquecedor

6.3 Estudo de Caso

Uma refinaria de alumina passou por um projeto de expansão, onde foram instalados três novos calcinadores. Com intuito de aumentar eficiência e reduzir custos, foi desenvolvida uma nova concepção para o *design* dos calcinadores em relação aos calcinadores que até então dispunham.

Nos primeiros seis meses, durante o período de comissionamento das novas unidades de calcinação, observaram-se vários impactos negativos relacionados ao novo sistema de combustão. Dentre eles, destacavam-se as temperaturas excessivas na parede externa dos vasos, indicando um desgaste prematuro do refratário, colocando a integridade do calcinador em risco.

As FIG. 16 e FIG.17, mostram uma falha prematura em um dos vasos (pré-aquecedor) da nova unidade de calcinação dessa refinaria.

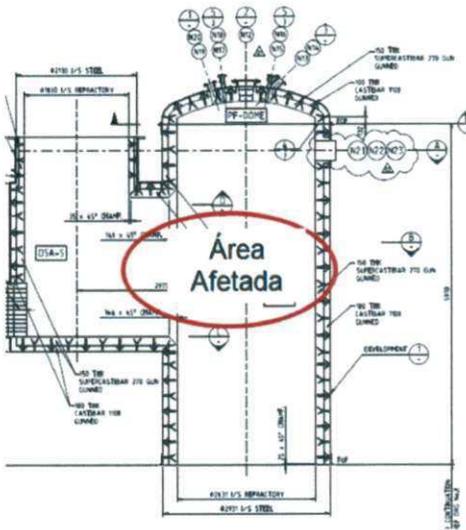


FIGURA 16 – Visão geral do Pré-aquecedor



FIGURA 17 – Região do pré-aquecedor incluindo área afetada danificada, segundo informações disponibilizadas

A simulação da fluidodinâmica do ar em um pré-aquecedor, demonstrada neste trabalho, teve como base o pré-aquecedor e as condições operacionais disponibilizadas por esta refinaria. A FIG. 18 representa a região onde ocorre a falha prematura no equipamento, segundo informações disponibilizadas pela refinaria. Observando a FIG. 19, percebe-se que o modelo proposto neste trabalho consegue prever o superaquecimento local em região próxima àquela onde se encontrou a falha prematura do equipamento na aplicação real.

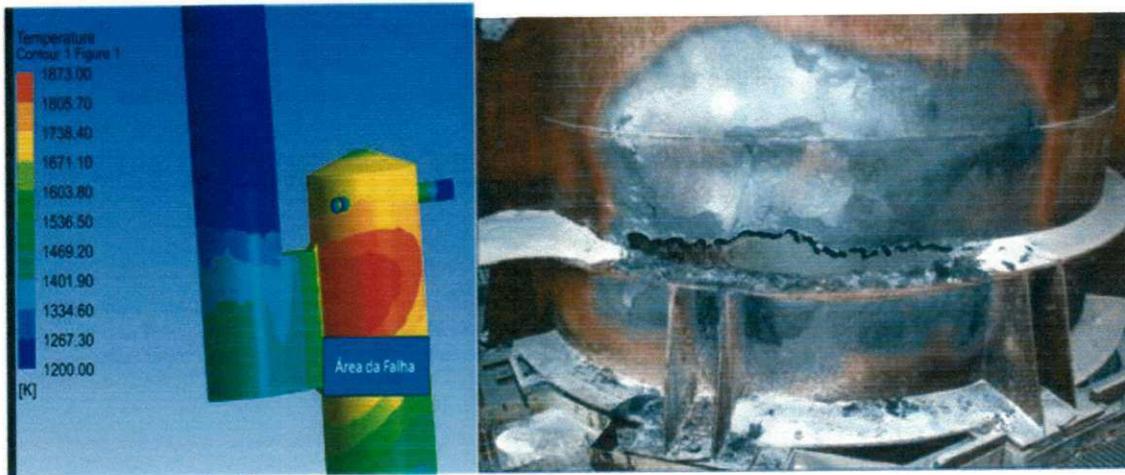


FIGURA 18 - Área afetada, segundo informações disponibilizadas pela indústria

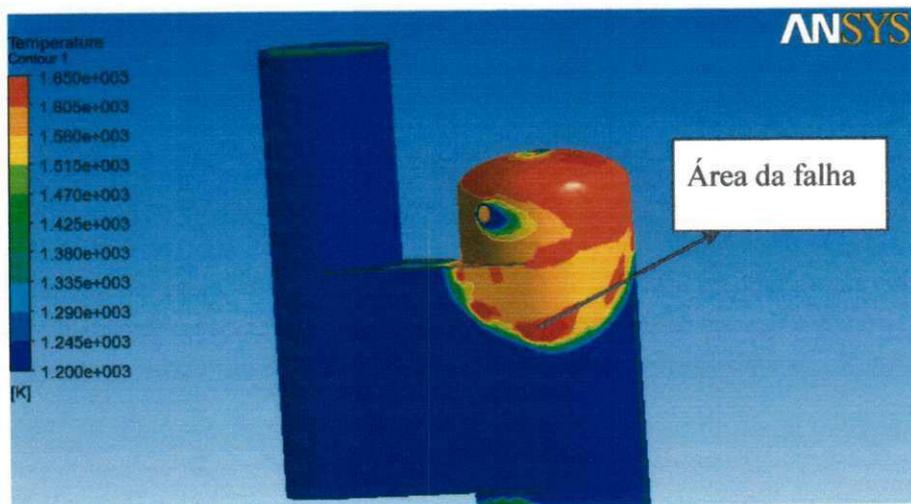


FIGURA 19 - Área afetada, segundo simulação realizada na UFCG

Capítulo 7

7. CONCLUSÕES

Tendo em vista o estudo de caso analisado, o trabalho desenvolvido atingiu seus objetivos, geral e específico, já que o modelo implementado, com todas as suposições estabelecidas para realização de uma simulação numérica mais robusta, se mostrou eficaz, no que diz respeito à capacidade de prever a região onde acontece a falha prematura do equipamento. Além disso, tendo como base as referências bibliográficas pesquisadas, os resultados correspondem a uma situação coerente com o esperado em sistemas de combustão do tipo *non premixed flames*.

O estudo da fluidodinâmica do pré-aquecedor, desta forma, se presta a ser uma ferramenta poderosa na proposta de uma estratégia de ação eficiente que potencialize o aumento no tempo de vida residual do material refratário dos vasos do calcinador.

7.1 Sugestões para trabalhos futuros

Uma proposta para solução do problema considerado neste trabalho é alterar a posição de alimentação e vazão do ar secundário (entrada lateral do ar), de modo a deslocar a chama para o centro do vaso.

Outra linha de ação poderia ser a redução da temperatura do ar de alimentação lateral, favorecendo o resfriamento da mistura e, assim, permitindo uma operação mais duradoura, em se tratando de paradas para reparos e manutenção.

Em se tratando de redução de temperatura, deve-se avaliar o impacto na temperatura de saída do pré-aquecedor, já que é necessária uma temperatura mínima para alimentação do forno, por questões de eficiência energética.

Ainda é interessante realizar estudo dos impactos que as alterações podem trazer na qualidade do processo, para que as alterações propostas não sejam proibitivas no que diz respeito a outros interesses.

Capítulo 8

8. REFERÊNCIAS

ALCOA. **Alumina & Produtos Químicos – Processo de Produção**. Disponível em: <http://www.alcoa.com/brazil/pt/custom_page/mercados_alumina_processo.asp>
Acesso em: Julho de 2010.

BLANCO, J. M., CHÁCON, J., SALA, J. M., **Investigation on the Design and Optimization of a Low NO_x – CO Emission Burner Both Experimentally and through Computational Fluid Dynamics (CFD) Simulations**, Energy & Fuels , 21: 42 – 58, 2007.

CEBECI, T. e SMITH, A.M. **Analysis of Turbulent Boundary Layers**. Acadmic Press New York, U.S.A, 1974

COCHRAN, C. N. **Energy Balance of Aluminum – From Production to Application**. Journal of Metals, Vol. 33, nº 7, July 1981, pp 45-48.

CURSINO, Gustavo Gomes Sampaio. **Simulação Computacional em CFD do Pré-Aquecedor da Nova Geração de Calcinadores de Leito Fluidizado utilizado em Refinaria de Alumina**. Exame de Qualificação (Doutorado – Engenharia Química) – Universidade Federal de Campina Grande, 2009. Orientador: Dr. José Jailson Nicácio Alves.

DAMKOHLER, G. Jahrb. deut. Luftfahrtforsch Z. **ELETROCHEM.** 1940, p. 601. Transation, NACA Tech. Menmo 1112, 1947.

HABASHI, F. **A short history of hydrometallurgy.** *Hydrometallurgy*, n.79, pp. 15-22, 2005.

HIND, R. A., BHARGAVA, S. K., GROCOTT, S. C., **The surface chemistry of Bayer process solids: a review",** *Colloids and surfaces A: Physicochemical and engineering aspects*, n. 146, pp.359-374, 1999.

KIM, Y., KIM, H. K., **Studies on Combustion Characteristics and Flame Length of Turbulent Oxy – Fuel Flames,** *Energy & Fuels*, 21: 1459 – 1467, 2007.

LAUNDER, B. E. and SPALDING, D. B. **The Numerical Computation of Turbulent Flows** *COMPUTER METHODS IN APPLIED MECHANICS AND ENGINEERING*, 3:269-289, 1974.

LEE, D. K.; KIM, M. U.; SHIN, H. D; **Combust. Theory Model;** 587–615, 2005

LIXING, Z. **Theory and Numerical Modelling of Turbulent Gas-Particle Flows and Combustion** *Science Press*, 231p, 1993.

LUSSKY, E. W. **Experience with Operation of the Alcoa fluid Flash Calciner.** Alcoa paper, June 1979.

MAGNUSSEN, B. F. e HJERTAGER, B. H. **On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion.** In *Proceedings of the 16th Symposium (International) on Combustion 1976*

MALISKA, C. R. Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional. LTC - Livros Técnicos e Científicos - Editora S.A., 2004.

PATANKAR, S. V. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Hemisphere Publishing Corporation, 1980.

RAITHBY, G. D; Equations Of Motions For Reacting, Particle Laden Flows THERMAL SCIENCE LTDA. Progress Report, 1991.

RONEL, J., BALIGA, P. F. A Finite Element Method for Unstead Heat Conduction in Materials with or whitout Phase Change AMERICAN SOCIETY OF MECHANICAL, 1979

SPALDING, D. B; Mixing and Chemical Reaction in Steady Confined Turbulent Flames Thirteenth Symposium (International) on Combustion The Combustion Institute, pp. 649-657, 1971.

SCHNEIDER, G. E., RAW, M. J. A Skewed, Positive Influence Coefficient Upwinding Procedure for Control-Volume-Based Finite Element Convection-Difusion Computation NUMERICAL HEAT TRANSFER 8:1-26, 1986.

SCHNEIDER, G. E., RAW, M. J. Control Volume Finite Element Method for Heat Transfer and Fluid Flow Using Co-Located Variables-1. Computational Procedure NUMERICAL HEAT TRANSFER 11:363-390, 1987.

SHIN, H. D., GUAHK, Y. T., LEE, D. K., OH, K. C., **Flame-Intrinsic Kelvin-Helmholtz Instability of Flickering Premixed Flames**, *Energy & Fuels* , 23: 3875 – 3884, 2009.

VERSTEEG, H. K., MALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics - The Finite Volume Method**. England: Longmsn Group Ltda. 1995

ZARNESCU, V., PISSUPATI, V., **The Effect of Mixing Model and Mixing Characteristics on NO_x Reduction during Reburning**, *Energy & Fuels* , 15: 363 – 371, 2001.

ZARNESCU, V., PISSUPATI, V., **An Integrative Approach for Combustor Design Using CFD Methods**, *Energy & Fuels* , 16: 622 – 633, 2002.

ZIVKOVIC, Z. D. and M. Filipovic; **Change of Granulometric Composition During Calcination of Aluminum Hydroxide**. *Travaux*, pp. 383 – 389, 1981.

WAO. **World Aluminium Organization**. Disponível em: <<http://www.world-aluminium.org/environment/challeges/residue.html>>. Acesso em: Julho de 2010.

APÊNDICE A

Os quadros abaixo trazem as propriedades do óleo BPF utilizado no sistema de combustão dos calcinadores da refinaria de alumina em questão, e do CH₄ utilizado na simulação.

Óleo BPF utilizado na Alumar				
Poder calorífico (Gj/Ton)	Enxofre (%)	Densidade (g/cm ³)	Viscosid. (SSF)	V205 (%)
42,19	0,88	1,00	511,75	0,01

Dados do CH ₄	
Poder Calorífico (GJ/Ton)	Densidade (g/cm ³)
47,14	0,000717

Sendo:

$Q_{m(\text{óleo})}$ = vazão mássica do óleo do óleo BPF utilizado na fábrica

$P_{C(\text{óleo})}$ = Poder calorífico do óleo BPF

Podemos calcular a taxa de energia fornecida pelo óleo BPF através da equação:

$$E_{\text{óleo}} = Q_{m(\text{óleo})} \cdot P_{C(\text{óleo})}$$

Onde:

$E_{\text{óleo}}$ = Energia fornecida pela queima do óleo.

Essa mesma fórmula pode ser aplicada para calcular a energia fornecida pela queima do metano (CH₄):

$$E_{CH_4} = Q_{m(CH_4)} \cdot P_{C(CH_4)}$$

Onde:

E_{CH_4} = Energia fornecida pela queima do gás

Para se ajustar a vazão de CH₄ de forma a manter a mesma energia fornecida pela queima do óleo BPF, devemos ter $E_{CH_4} = E_{\text{óleo}}$. Assim a vazão mássica de CH₄ pode ser calculado como segue:

$$Q_{m(CH_4)} = \frac{Q_{m(\text{óleo})} \cdot P_{c(\text{óleo})}}{P_{c(CH_4)}}$$

Como dispomos dos valores dos poderes caloríficos destes dois combustíveis e da vazão mássica de alimentação de óleo BPF adotada pela fábrica, se faz um cálculo simples da vazão mássica de CH₄ que devemos ajustar na modelagem do problema.

APÊNDICE B

O ajuste do diâmetro de alimentação do metano (CH₄) se dá pela determinação da área de entrada desse combustível, que atenda as necessidades da simulação, no que se refere a pressão de entrada e, conseqüente, característica da chama produzida. A área disponível para alimentação de combustível pode ser calculada através da fórmula:

$$A = \frac{Q_v}{v}$$

Onde:

A = área de entrada do combustível (m²)

Q_v = Vazão volumétrica do combustível (m³/s)

v = velocidade de alimentação do combustível (m/s)

Pode-se demonstrar, a partir de análise dimensional, que a velocidade de alimentação de um combustível é dependente da pressão através da fórmula:

$$v = \sqrt{\frac{P}{\rho}}$$

Onde:

P = Pressão de alimentação do combustível

ρ = densidade do combustível utilizado

Sabendo que a vazão volumétrica pode ser obtida a partir da vazão mássica*, através da equação:

$$Q_v = \frac{Q_m}{\rho}$$

*A vazão mássica adotada foi calculada como demonstrado no Apêndice A

Onde:

Q_m = vazão mássica do combustível

Podemos condensar essas expressões para obter uma única equação, que segue:

$$A = Q_m \sqrt{\frac{1}{\rho \cdot P}}$$

O diâmetro da entrada da alimentação de combustível, pode ser encontrada através do conhecimento da área, pela equação:

$$d = \sqrt{\frac{A \cdot 4}{\pi}}$$

Assim, podemos perceber que, se pretendemos manter uma mesma pressão de alimentação para um combustível diferente, que tem, portanto, diferente densidade, para uma vazão mássica pré-estabelecida, devemos alterar a área de entrada desse combustível, ou seja, o diâmetro do orifício de entrada. Como a densidade do gás metano é significativamente menor que a do óleo BPF, perceberemos que, utilizando a equação geral encontrada temos que aumentar o diâmetro de entrada do combustível.

No entanto, o diâmetro de entrada calculado, para um valor que mantivesse a pressão de alimentação encontrada no caso do uso do óleo BPF atomizado, promoveria uma alimentação de gás em uma velocidade superior à velocidade do som. Para efeito de escoamento de fluido, isso implica em uma barreira sônica que impede uma simulação realística.

Assim, o diâmetro de entrada foi alterado gradualmente, a partir do diâmetro calculado pelas formulações aqui discutidas, procurando um limite que aproximasse as características da chama encontradas para o óleo atomizado, sem que para isso, a velocidade de alimentação ultrapassasse a velocidade do som.

APÊNDICE C

Modelagem da Fluidodinâmica do pré-aquecedor, implementada no CFX-pre:

```
FLOW: Flow Analysis 1
ANALYSIS TYPE:
Option = Steady State
EXTERNAL SOLVER COUPLING:
Option = None
END
END
DOMAIN: Default Domain
Coord Frame = Coord 0
Domain Type = Fluid
Location = B238
BOUNDARY: Default Domain Default
Boundary Type = WALL
Create Other Side = Off
Interface Boundary = Off
Location =
F227.238,F230.238,F231.238,F232.238,F236.238,F240.238,F242.238,F303.238,F304.238,F31
5.238
BOUNDARY CONDITIONS:
HEAT TRANSFER:
Option = Adiabatic
END
MASS AND MOMENTUM:
Option = No Slip Wall
END
THERMAL RADIATION:
Diffuse Fraction = 1.
Emissivity = 1.
Option = Opaque
END
WALL ROUGHNESS:
Option = Smooth Wall
END
END
END
BOUNDARY: Fuelin
Boundary Type = INLET
Interface Boundary = Off
Location = F235.238
BOUNDARY CONDITIONS:
COMPONENT: CH4
Mass Fraction = 1
```

Option = Mass Fraction
 END
 COMPONENT: CO2
 Mass Fraction = 0.0
 Option = Mass Fraction
 END
 COMPONENT: H2O
 Mass Fraction = 0.0
 Option = Mass Fraction
 END
 COMPONENT: NO
 Mass Fraction = 0.0
 Option = Mass Fraction
 END
 COMPONENT: O2
 Mass Fraction = 0.0
 Option = Mass Fraction
 END
 FLOW DIRECTION:
 Option = Normal to Boundary Condition
 END
 FLOW REGIME:
 Option = Subsonic
 END
 HEAT TRANSFER:
 Option = Static Temperature
 Static Temperature = 150 [C]
 END
 MASS AND MOMENTUM:
 Mass Flow Rate = 0.4 [kg s⁻¹]
 Option = Mass Flow Rate
 END
 THERMAL RADIATION:
 Option = Local Temperature
 END
 TURBULENCE:
 Option = Medium Intensity and Eddy Viscosity Ratio
 END
 END
 END
 BOUNDARY: airin
 Boundary Type = INLET
 Coord Frame = Coord 1
 Interface Boundary = Off
 Location = F234.238
 BOUNDARY CONDITIONS:
 COMPONENT: CH4
 Mass Fraction = 0.0
 Option = Mass Fraction

END
 COMPONENT: CO2
 Mass Fraction = 0.0
 Option = Mass Fraction
 END
 COMPONENT: H2O
 Mass Fraction = 0.0
 Option = Mass Fraction
 END
 COMPONENT: NO
 Mass Fraction = 0.0
 Option = Mass Fraction
 END
 COMPONENT: O2
 Mass Fraction = 0.232
 Option = Mass Fraction
 END
 FLOW DIRECTION:
 Option = Normal to Boundary Condition
 END
 FLOW REGIME:
 Option = Subsonic
 END
 HEAT TRANSFER:
 Option = Static Temperature
 Static Temperature = 130 [C]
 END
 MASS AND MOMENTUM:
 Mass Flow Rate = 0.85 [kg s⁻¹]
 Option = Mass Flow Rate
 END
 THERMAL RADIATION:
 Option = Local Temperature
 END
 TURBULENCE:
 Option = Medium Intensity and Eddy Viscosity Ratio
 END
 END
 END
 BOUNDARY: inletAR
 Boundary Type = INLET
 Interface Boundary = Off
 Location = F233.238
 BOUNDARY CONDITIONS:
 COMPONENT: CH4
 Mass Fraction = 0.0
 Option = Mass Fraction
 END
 COMPONENT: CO2

Mass Fraction = 0.0
Option = Mass Fraction
END
COMPONENT: H2O
Mass Fraction = 0.0
Option = Mass Fraction
END
COMPONENT: NO
Mass Fraction = 0.0
Option = Mass Fraction
END
COMPONENT: O2
Mass Fraction = 0.232
Option = Mass Fraction
END
FLOW DIRECTION:
Option = Normal to Boundary Condition
END
FLOW REGIME:
Option = Subsonic
END
HEAT TRANSFER:
Option = Static Temperature
Static Temperature = 539 [C]
END
MASS AND MOMENTUM:
Mass Flow Rate = 31.93 [kg s⁻¹]
Option = Mass Flow Rate
END
THERMAL RADIATION:
Option = Local Temperature
END
TURBULENCE:
Option = Medium Intensity and Eddy Viscosity Ratio
END
END
END
BOUNDARY: out
Boundary Type = OUTLET
Interface Boundary = Off
Location = F241.238
BOUNDARY CONDITIONS:
FLOW REGIME:
Option = Subsonic
END
MASS AND MOMENTUM:
Option = Average Static Pressure
Pressure Profile Blend = 0.05
Relative Pressure = 7800 [Pa]

END
PRESSURE AVERAGING:
Option = Average Over Whole Outlet
END
THERMAL RADIATION:
Option = Local Temperature
END
END
END
BOUNDARY: sideairin
Boundary Type = INLET
Interface Boundary = Off
Location = F302.238,F301.238,F300.238
BOUNDARY CONDITIONS:
COMPONENT: CH4
Mass Fraction = 0.0
Option = Mass Fraction
END
COMPONENT: CO2
Mass Fraction = 0.0
Option = Mass Fraction
END
COMPONENT: H2O
Mass Fraction = 0.0
Option = Mass Fraction
END
COMPONENT: NO
Mass Fraction = 0.0
Option = Mass Fraction
END
COMPONENT: O2
Mass Fraction = 0.232
Option = Mass Fraction
END
FLOW DIRECTION:
Option = Normal to Boundary Condition
END
FLOW REGIME:
Option = Subsonic
END
HEAT TRANSFER:
Option = Static Temperature
Static Temperature = 130 [C]
END
MASS AND MOMENTUM:
Mass Flow Rate = 0.44 [kg s⁻¹]
Option = Mass Flow Rate
END
THERMAL RADIATION:

Option = Local Temperature
END
TURBULENCE:
Option = Medium Intensity and Eddy Viscosity Ratio
END
END
END
DOMAIN MODELS:
BUOYANCY MODEL:
Option = Non Buoyant
END
DOMAIN MOTION:
Option = Stationary
END
MESH DEFORMATION:
Option = None
END
REFERENCE PRESSURE:
Reference Pressure = 1 [atm]
END
END
FLUID DEFINITION: Fluid 1
Material = Methane Air Mixture
Option = Material Library
MORPHOLOGY:
Option = Continuous Fluid
END
END
FLUID MODELS:
COMBUSTION MODEL:
Eddy Dissipation Model Coefficient B = 0.5
Maximum Flame Temperature = 1300 [C]
Option = Eddy Dissipation
END
COMPONENT: CH4
Option = Automatic
END
COMPONENT: CO2
Option = Automatic
END
COMPONENT: H2O
Option = Automatic
END
COMPONENT: N2
Option = Constraint
END
COMPONENT: NO
Option = Automatic
END

COMPONENT: O2
Option = Automatic
END
HEAT TRANSFER MODEL:
Option = Thermal Energy
END
THERMAL RADIATION MODEL:
Option = P 1
SCATTERING MODEL:
Option = None
END
SPECTRAL MODEL:
Option = Gray
END
END
TURBULENCE MODEL:
Option = SSG Reynolds Stress
END
TURBULENT WALL FUNCTIONS:
Option = Scalable
END
END
END
INITIALISATION:
Option = Automatic
INITIAL CONDITIONS:
Velocity Type = Cartesian
CARTESIAN VELOCITY COMPONENTS:
Option = Automatic
END
COMPONENT: CH4
Option = Automatic
END
COMPONENT: CO2
Mass Fraction = 0.01
Option = Automatic with Value
END
COMPONENT: H2O
Mass Fraction = 0.01
Option = Automatic with Value
END
COMPONENT: NO
Option = Automatic
END
COMPONENT: O2
Mass Fraction = 0.232
Option = Automatic with Value
END
RADIATION INTENSITY:

Option = Automatic
END
STATIC PRESSURE:
Option = Automatic
END
TEMPERATURE:
Option = Automatic
END
TURBULENCE INITIAL CONDITIONS:
Option = Medium Intensity and Eddy Viscosity Ratio
END
END
END
OUTPUT CONTROL:
RESULTS:
File Compression Level = Default
Option = Standard
END
END
SOLUTION UNITS:
Angle Units = [rad]
Length Units = [m]
Mass Units = [kg]
Solid Angle Units = [sr]
Temperature Units = [K]
Time Units = [s]
END
SOLVER CONTROL:
Turbulence Numerics = First Order
ADVECTION SCHEME:
Option = High Resolution
END
CONVERGENCE CONTROL:
Maximum Number of Iterations = 1000
Minimum Number of Iterations = 1
Physical Timescale = 0.025 [s]
Timescale Control = Physical Timescale
END
CONVERGENCE CRITERIA:
Residual Target = 1.E-4
Residual Type = RMS
END
DYNAMIC MODEL CONTROL:
Global Dynamic Model Control = On
END
END
END