

UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
COORDENAÇÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO

APLICAÇÃO DE TÉCNICAS DE FLUIDODINÂMICA
COMPUTACIONAL (CFD) EM FORNOS PARA A PRODUÇÃO
DE ANODOS DE CARBONO

ANTONIO TAVERNARD PEREIRA NETO

CAMPINA GRANDE – PARAÍBA

2008

APLICAÇÃO DE TÉCNICAS DE FLUIDODINÂMICA
COMPUTACIONAL (CFD) EM FORNOS PARA A PRODUÇÃO
DE ANODOS DE CARBONO

ANTONIO TAVERNARD PEREIRA NETO

Dissertação apresentada à
Universidade Federal de
Campina Grande como parte
dos requisitos exigidos para
a obtenção do título de
Mestre em Engenharia
Química

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA CENTRAL DA UFCG

P436a Pereira Neto, Antonio Tavernard

Aplicação de técnicas de Fluidodinâmica Computacional (CFD) em Fornos para a Produção de Anodos de Carbono / Antonio Tavernard Pereira Neto. □ Campina Grande, 2011.

75 f.: il. ; col.

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

Orientadores: Prof^o. Dr. José Jaílson Nicácio Alves e Prof^o. Dr. Romildo Pereira Brito.

Referências.

1. Anodo. 2. CFD. 3. Cozimento. 4. Alumínio. I. Título.

CDU 544.6.076.324.2(043)



APLICAÇÃO DE TÉCNICAS DE FLUIDODINÂMICA
COMPUTACIONAL (CFD) EM FORNOS PARA A PRODUÇÃO
DE ANODOS DE CARBONO

ANTONIO TAVERNARD PEREIRA NETO

Dissertação aprovada em: 30 / 06 / 08

Banca Examinadora



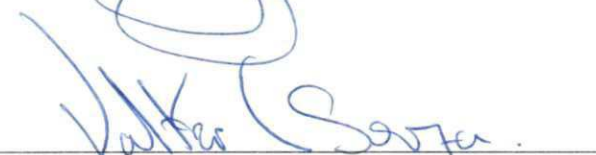
Prof. Dr. José Jailson Nicácio Alves
Orientador



Prof. Dr. Romildo Pereira Brito
Orientador



Prof. Dr. Henry França Meier
Examinador



Dr. Valter César de Souza
Examinador

AGRADECIMENTOS

À Deus e Nossa Senhora por tudo.

Ao Professor José Jailson pela amizade, orientação prestada e, um agradecimento especial, pela oportunidade oferecida de trabalhar no LENP sob sua coordenação.

À Dr. Romildo Brito pela orientação prestada.

À CNPq pelo auxílio financeiro prestado.

À Universidade Federal de Campina Grande.

Aos Professores e funcionários do DEQ/UFCG.

À Minha Noiva Janiely por todo amor, companheirismo e paciência.

A minha mãe Nefretire e, aos meus irmãos, Ivanilson e Rudy, pelo incentivo, amor e carinho.

Ao meu pai (em memória)

Aos meus avós pelo apoio.

À todos que contribuíram, direto ou indiretamente, para a realização deste trabalho meus sinceros agradecimentos!

RESUMO

A qualidade do ânodo usado na indústria de alumínio depende fortemente no processo de cozimento. Em geral, é desejável para alcance uma temperatura mais uniforme dentro do ânodo durante o processo de aquecimento.

O aquecimento desses anodos na etapa de cozimento é realizado de forma indireta em poços envoltos por tijolos refratários e cobertos por coque de petróleo (para proteção contra oxidação), onde na seção adjacente existem câmaras de combustão, que são formadas por canais de passagem de gases aquecidos que fornecem o calor necessário para o aquecimento dos anodos nos poços. Este calor depende de variáveis como pressão, vazão de ar, quantidade de combustível injetado dentro das câmaras e geometria do poço.

O principal objetivo deste estudo é apresentar um modelo computacional capaz de prever a distribuição de temperatura baseado nos parâmetros que fazem parte do processo de cozimento, tal como, juntou fluxo fluido e transferência de calor passageira, queima de voláteis, combustão de diesel, radiação e controle de sistema de controle. As simulações foram feitas usando o CFD comercial CFX10 da ANSYS. Este modelo pode ser usado como uma poderosa ferramenta no desenvolvimento de novos fornos e reajustar modelos existentes.

ABSTRACT

The quality of the anode used in the aluminum industry depends strongly on the baking process. In general, it is desirable to achieve a more uniform temperature inside the anode during the heating process, combined with lower soaking time and energy consumption.

The heating of those anodes in the baking stage is accomplished in an indirect way in wrapped up wells for difficult bricks and covered by coke of petroleum (for protection against oxidation), where in the adjacent section combustion chambers exist, that are formed by channels of passage of warm gasses that supply the necessary heat for the heating of the anodes in the wells. This heat depends on variables as pressure, flow of air, amount of fuel injected inside of the furnaces and geometry of the well.

The main objective of this study is to present a computational model able to predict the temperature distribution based on the parameters that play a role in the baking process, such as, coupled fluid flow and transient heat transfer, burning of volatiles, fuel combustion, radiation and control system. The simulations were done using the commercial CFD CFX10 from ANSYS. This model can be used as a powerful tool in the development of new furnaces and retrofitting existing ones.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Descrição do Processo	1
1.1.1	O Eletrólito	2
1.1.2	Resistência Elétrica das Cubas	6
1.1.3	Sistema de Alimentação de Alumina.....	6
1.1.4	Alumina.....	8
1.1.5	Eletrodos	8
1.2	Descrição do Problema	15
1.3	Objetivos do Trabalho.....	18
1.4	Organização da Dissertação	19
2	Fundamentação Teórica	20
3	Modelagem Matemática	23
3.1	Formulação dos Modelos	23
3.1.1	Uma visão geral.....	23
3.2	Equações de Conservação	24
3.2.1	Conservação da Massa.....	24
3.2.2	Transporte da Quantidade de Movimento.....	25
3.3	Conservação da Energia.....	26
3.4	Conservação das Espécies Química.....	28
3.5	Generalização das Equações de Transporte para escalares.....	29
3.6	Turbulência.....	29
3.7	Modelos de Turbulência.....	31
3.7.1	Modelo $k - \varepsilon$ de Turbulência.....	33
3.8	Modelos de Combustão Turbulenta.....	36
3.8.1	Equacionamento Geral.....	36
3.8.2	Equação das Espécies Químicas.....	37
3.8.3	Modelo de Dissipação Eddy.....	38
3.8.4	Modificação da Equação da Energia	39
3.8.5	Intensidade de Radiação Térmica.....	39
4	Métodos Numéricos	41
4.1	Equações de Transporte	41
4.2	Método dos Volumes Finitos com Base em Elementos Finitos.....	42

4.2.1	Discretização das Equações de Transporte	43
4.3	Termo Transiente.....	45
4.4	Termos Convectivos	46
4.5	Termos Difusivos.....	46
4.6	Gradiente de Pressão.....	47
4.7	Acoplamento Pressão Temperatura	47
5	Resultados	49
5.1	Geometria e malha da câmara	49
5.2	Validação do modelo	51
5.3	Influência da geometria na dinâmica do processo.....	55
5.3.1	Efeito do fluxo de ar e combustível.....	55
5.3.2	Efeito da distribuição de temperatura no anodo.....	57
5.4	Influência do ciclo de cozimento.....	60
6	Conclusões.....	68
7	Referências Bibliográficas	69
	APÊNDICE A Subrotina de Controle de Vazão	72

Lista de Figuras

Figura 1 Cuba eletrolitica modelo A697 - Alcoa Inc.....	1
Figura 2 Efeito dos aditivos na massa específica do banho a 1000°C (BURKIN, 1987).....	4
Figura 3 Efeito dos aditivos na tensão interfacial entre o metal e o eletrólito a 1000°C (BURKIN, 1987).	5
Figura 4 Anodos pré-cozidos.....	9
Figura 5 Esquema do forno de cozimento de anodos.	10
Figura 6 Vista lateral dos fornos de cozimento de anodos.....	11
Figura 7 Forno de cozimento de anodos.	11
Figura 8 Passagem de corrente em uma cuba eletrolítica	12
Figura 9 Esquema de um forno de cozimento de anodo.	16
Figura 11 Exemplo de geometria de câmara.	21
Figura 12 Exemplo de perfil de velocidade.....	22
Figura 13: Definição de um volume de controle bidimensional	44
Figura 14 Definição dos pontos de integração para um elemento 2-D quadrilátero	44
Figura 15 Vista frontal da geometria da câmara.....	49
Figura 16 Vista oposta da geometria da câmara.....	50
Figura 17 Vista frontal da malha utilizada da câmara	50
Figura 18 Curva de cozimento de anodos	51
Figura 19 Curva de cozimento de anodos	52
Figura 20 campo de temperatura simulado.	53
Figura 21 campo de temperatura real.....	53
Figura 22 Curva de cozimento simulada sem a etapa de resfriamento.....	54
Figura 23 Curva de cozimento real completa.....	54
Figura 24 Campo de velocidade na câmara para a condição com tijolo interno.	55
Figura 25 campo de velocidade na câmara com abertura nas chicanas.	56
Figura 26 campo de velocidade na câmara com tijolos em posições alternadas.	56
Figura 27 Distribuição de temperatura no anodo.	57
Figura 28 Distribuição de temperatura no anodo.	58
Figura 29 Distribuição de temperatura no anodo.	58
Figura 30 Distribuição de temperatura no anodo.	59
Figura 31 Perfil de temperatura no anodo para o 1º estágio com ciclo de 20	60
Figura 32 Perfil de temperatura no anodo para o 1º estágio com ciclo de 24h	60
Figura 33 Perfil de temperatura no anodo para o 2º estágio com ciclo de 20h.	61

Figura 34 Perfil de temperatura no anodo para o 2º estágio com ciclo de 24h	61
Figura 35 Perfil de temperatura no anodo para o 3º estágio com ciclo de 20h	62
Figura 36 Perfil de temperatura no anodo para o 3º estágio com ciclo de 24h	62
Figura 37 campo de temperatura no anodo para o 4º estágio com ciclo de 20h	63
Figura 38 campo de temperatura no anodo para o 4º estágio com ciclo de 24h	63
Figura 39 campo de temperatura no anodo para o 5º estágio com ciclo de 20h	64
Figura 40 campo de temperatura no anodo para o 5º estágio com ciclo de 24h	64
Figura 41 campo de temperatura no anodo para o 6º estágio com ciclo de 20h	65
Figura 42 campo de temperatura no anodo para o 6º estágio com ciclo de 24h	65
Figura 43 campo de temperatura no anodo para o 7º estágio com ciclo de 20h	66
Figura 44 campo de temperatura no anodo para o 7º estágio com ciclo de 24h	66

Lista de Tabelas

Tabela 1 Comparação entre desempenho do processo nos últimos 50 anos (Grjotheim et al., 1995).	2
Tabela 2 Efeito de aditivos e temperatura sobre as propriedades da alumina.....	5
Tabela 3 Contribuições do consumo do carbono do anodo (GRJOTHEIM e KVANDE, 1986).	13
Tabela 4 Fundamentos da Fluidodinâmica.....	24
Tabela 5 Modelos de Turbulência baseados nas Equações de Reynolds (média-temporal)....	32
Tabela 6 Constantes do Modelo $k - \varepsilon$ Padrão	36

Nomenclatura

Letras Latinas

a , aceleração, m/s^2

c_μ constante do modelo $k - \varepsilon$ padrão.

C_p calor específico a pressão constante, $J \cdot Kg^{-1} \cdot K^{-1}$

C_A, C_B , concentração dos reagentes A e B, $kmol/m^3$

e energia interna J/kg

E energia interna J/kg

E_T temperatura de ativação K

f_i forças do corpo

f_k fração mássica do primeiro produto formado na reação k

F forças, $kg \cdot m/s^2 = N$

h entalpia estática, J/kg

H entalpia total, J/kg

k energia cinética turbulenta, m^2/s^2

l_t comprimento de escala turbulenta

m massa, kg

\vec{n} vetor unitário normal à superfície

P pressão, N/m^2

Pr número de Prandtl

P_k taxa de produção de energia cinética turbulenta, Pa/s

Q fluxo de energia transferido por condução, W/m^2

r_k fração mássica

R constante universal dos gases ideais, $J \cdot kmol^{-1} \cdot K^{-1}$

R_k taxa de formação/consumo da k-ésima reação, $kg \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$

S termo fonte

S_c número de Schmidt

t tempo, s

T temperatura, $K = ^\circ C + 273$

u componente da velocidade direção x , m/s

U vetor velocidade, m/s

V_t escala turbulenta de velocidade

v componente da velocidade direção y , m/s

Vol volume total de um volume de controle

w componente da velocidade direção z , m/s

W função ponderação

x vetor direção espacial e coordenada cartesiana espacial, m

y coordenada cartesiana espacial, m

Y fração mássica da espécie química

z coordenada cartesiana espacial, m

Letras Gregas

ε taxa de dissipação de energia cinética turbulenta, m^2/s^3

ϕ propriedade escalar genérica

Φ razão de equivalência

φ flutuação de uma propriedade escalar genérica

Γ coeficiente de difusão

λ condutividade térmica, $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$

δ delta de Kronecker

μ viscosidade, $kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$

ρ massa específica, kg / m^3

σ_k, σ_e constante do modelo $k - \varepsilon$ padrão

τ tensor tensão viscoso

Superescritos

* indica flutuação

— propriedade média temporal

" flutuação da média temporal

→ vetor

f relativo a formação

n numero de espécies químicas presentes na reação.

ϕ relativo a uma propriedade escalar genérica

Subscritos

cin relativo a cinética

E energia

ef valor efetivo

comb relativo ao combustão

i índice de direção espacial e espécie química

j índice de direção espacial

k índice de direção espacial

o relativo ao oxidante e propriedade no passo de tempo anterior

p relativo ao produto

t valor turbulento

1 Introdução

1.1 Descrição do Processo

Todo alumínio primário é produzido pelo processo Hall-Héroult (ARCHER et al., 1996). Este processo consiste basicamente na redução eletrolítica da alumina, dissolvida em um banho de criolita fundida ($3NaF \cdot AlF_3$). O banho fica a uma temperatura de aproximadamente 960°C. A Figura 1 apresenta o esquema de uma cuba eletrolítica desenvolvida pela Alcoa.

Com a decomposição da alumina, o oxigênio se dirige ao anodo (pólo positivo), e combina-se com ele, e o alumínio se deposita no fundo da célula eletrolítica (catodo, que é o pólo negativo). A principal reação eletroquímica que acontece no processo é a seguinte:

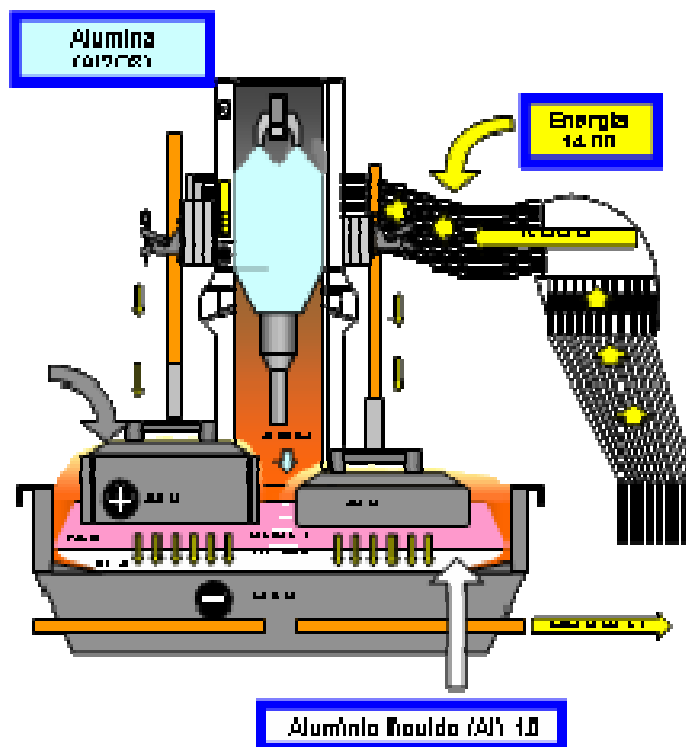
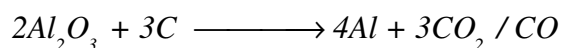
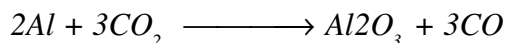


Figura 1 Cuba eletrolítica modelo A697 - Alcoa Inc.

Assumindo que o processo opere a 1 atm, a entalpia de reação será 550 kJ a 1000°C, a energia teórica para a produção de 1kg de Al, nesta temperatura é 5,64kWh/kg Al. Se não fosse utilizado o carbono como agente redutor, a energia seria de 8,69kWh/kg Al (GRJOTHEIM et al., 1982). Na prática este valor é de 14-15 kWh/kg Al. Um dos principais

motivos de perda de eficiência de corrente, conseqüentemente aumento do consumo de energia, porque uma pequena parte do metal sempre se dissolve no eletrólito e pode ser conduzido para próximo do anodo, sendo então, re-oxidado, de acordo com a reação a seguir (MENIUK, 1995 e GRJOTHEIM et al., 1982).



Os fundamentos do processo Hall-Héroult descritos acima, são os mesmos desde a sua descoberta. Porém muitos foram os desenvolvimentos nos últimos 50 anos. Dentre eles podemos citar melhorias na química do banho, alimentação de alumina, qualidade do anodo e catodo e controle de processo. Também muitos tem sido o progresso com relação ao tamanho e desenho da célula, capacidade de produção, consumo de energia e modelamento dos campos magnéticos (GRJOTHEIM et al., 1995). A Tabela 1 mostra alguns desenvolvimentos ocorridos ao longo destes anos, comparando uma célula de 1945 e outra de 1995.

Tabela 1 Comparação entre desempenho do processo nos últimos 50 anos (Grjotheim et al., 1995).

Parâmetros Operacionais	1945	1995
Corrente da célula (kA)	25-50	175-300
Voltagem (V)	5,0	4,1
Eficiência de corrente (%)	80-85	92-95
Consumo de Energia (kWh/kg Al)	20-25	13
Produção da célula (t / ano)	55	820
Operação da célula	Manual	Alta automação
Produção/ano por trabalhador	7t de Al	200t de Al
Condições de trabalho	Más	Boas

1.1.1 O Eletrólito

Fundamentalmente o eletrólito é uma solução de alumina em criolita fundida. A criolita é um fluoreto duplo de alumínio e sódio ($3NaF.AlF_3$). A escolha da criolita como solvente se deve a vários fatores, entre os quais podemos citar (GRJOTHEIM et al., 1995):

- é um bom solvente para a alumina;
- sua voltagem de decomposição é maior que a da alumina;
- possui boa condutividade elétrica quando fundida;
- sua temperatura de fusão é baixa com relação à alumina;
- não reage com o alumínio, nem com o carbono em grau que se possa considerar;
- quando fundida forma um fluido sem turbulência;

- Sua densidade é menor que a do alumínio, quando ambos estão fundidos;
- Tem uma baixa pressão de vapor.

Nas fábricas de alumínio o parâmetro mais utilizado para controlar a composição do banho é o ratio. O ratio é a relação entre a percentagem, em peso, do fluoreto de sódio e do fluoreto de alumínio. O ratio da criolita é 1,50. Como, normalmente, o banho contém AlF_3 em excesso, o valor do ratio é menor que 1,5. As modernas reduções procuram trabalhar com ratio baixo, isto aumenta a eficiência de corrente, devido menor dissolução do metal no banho e redução da temperatura de operação (GRJOTHEIM e KVANDE, 1986). Entretanto, o excesso de AlF_3 pode provocar um aumento demasiado da resistividade do banho, causando instabilidade da cuba.

Diminuindo o ratio (em peso) em 0,02 teremos (GRJOTHEIM e WELCH, 1988):

- Aumento no excesso de AlF_3 entre 0,6-0,8% em massa;
- Diminuição em 2°C no ponto de fusão;
- Aumento na resistência do banho em 0,4%;
- Redução na solubilidade da alumina em 0,25% em massa;
- Diminuição na densidade em 0,14%.

Segundo vários estudos, as propriedades mais importantes do banho são apresentadas a seguir (MENIUK, 1995; GRJOTHEIM e KVANDE, 1986; BURKIN, 1987):

a) Ponto de fusão; Esta propriedade deve ser a menor possível, pois menor energia será gasta para fundir o banho, logo maior será a eficiência de corrente. A temperatura de fusão pode ser expressa em função da percentagem em massa de CaF_2 , AlF_3 e Al_2O_3 . A equação obtida experimentalmente (BURKIN, 1987) é válida na faixa de 5-20% AlF_3 e 3,8 - 11,3% CaF_2 .

b) A solubilidade da alumina no banho; deve ser a maior possível para facilitar a dissolução da mesma. Todos os aditivos, exceto o fluoreto de potássio, diminuem tanto a solubilidade, quanto a taxa de dissolução de alumina no banho (BURKIN, 1987). Logo eles contribuem para geração de lama;

c) A massa específica também deve ser a menor possível, porque a separação entre o metal e banho será mais consistente e ocorrerá menos reoxidação do alumínio. A densidade do alumínio líquido é de $2,3 \text{ g/cm}^3$. A mudança causada na densidade do banho pelos aditivos deve manter uma diferença mínima entre a densidade do alumínio e do banho de $0,2 \text{ g/cm}^3$. A Figura 3 mostra o efeito dos aditivos na massa específica do banho.

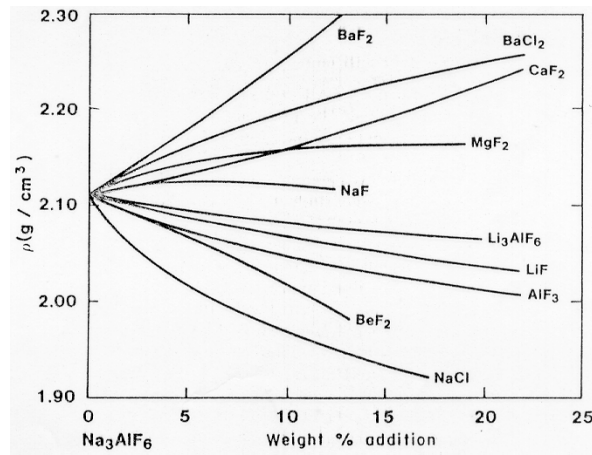


Figura 2 Efeito dos aditivos na massa específica do banho a 1000°C (BURKIN, 1987).

d) Condutividade elétrica; Esta é a propriedade físico-química de maior importância, visto que influencia diretamente o consumo de energia do processo. A condutividade elétrica (χ) pode ser calculada através da equação 1.1. Esta equação é em função da temperatura (t °C) e composição (%massa). Ela foi obtida experimentalmente (BURKIN, 1987) e é dada em S/cm;

$$\chi = EXP(2,0156 - (2068,4)/(T+273) + 0,4349(ratio) - 0,0207\%Al_2O_3 - 0,005\%CaF_2 - 0,0166\%MgF_2 + 0,0178\%LiF + 0,0077\%Li_3AlF_6) \quad 1.1$$

Onde:

χ = Condutividade elétrica

T = Temperatura

%C = Concentração da espécie química

e) Tensão interfacial; A tensão interfacial entre o metal e o eletrólito é definida como a diferença entre a tensão superficial do metal e do eletrólito. Esta propriedade deve ter o maior valor possível. Com isso, tem-se uma melhor separação entre eles e redução de transporte do metal na interface e no eletrólito, diminuindo a reoxidação. A tensão interfacial entre o eletrólito e o carbono deve, também, ser elevada para evitar penetração do eletrólito nos poros do carbono do anodo e catodo. A Figura 3 mostra que todos os fluoretos adicionados aumentam tensão interfacial entre o eletrólito e o alumínio, exceto o KF. O efeito da alumina nesta propriedade não é totalmente conhecido, porém há quem afirme que ela aumenta (GRJOTHEIM e KVANDE, 1986).

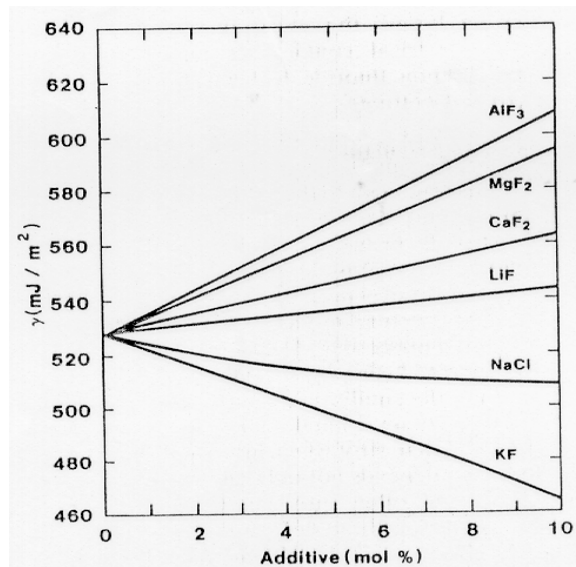


Figura 3 Efeito dos aditivos na tensão interfacial entre o metal e o eletrólito a 1000°C (BURKIN, 1987).

f) Viscosidade; Esta propriedade influencia alguns processos hidrodinâmicos na célula, como movimentação do metal, dispersão de gotas de alumínio no eletrólito, sedimentação de partículas de alumina e evolução de bolhas de gases do anodo. Um valor levado da viscosidade seria benéfico para reduzir o transporte do metal dissolvido no eletrólito para o anodo, diminuindo a reoxidação;

g) Pressão de vapor; As perdas de fluoretos por evaporação são fortemente determinadas por esta propriedade. Os vapores são ricos em AlF₃. Por causa disso, é necessário sempre o reajuste do ratio das cubas, através da adição de AlF₃.

A Tabela 2 apresenta o efeito da temperatura e de alguns aditivos, nas propriedades da alumina. Seta para cima indica que a propriedade aumenta. Seta para baixo indica o contrário. Seta em curva indica que o efeito é não linear. Espaço em branco indica que não há dados na literatura. Traço indica que não há influência (MENIUK, 1995; BURKIN, 1986).

Tabela 2 Efeito de aditivos e temperatura sobre as propriedades da alumina.

Aument. variável	Solubil. Al ₂ O ₃	Condut. elétrica	Densidade	Viscosidade	Temper. liquidus	Solubil. Al	Tensão suberf.	Pressão vapor
CaF ₂	↓	↓	↑	↗	↓	↓	↑	↓
AlF ₃	↓	↓	↓	↓	↘	↓	↓	↑
LiF	↓	↑	↓	↓	↓	↓	↑	↓
MgF ₂	↓	↓	↑	↑	↓	↓	↑	↓
NaCl	↓	↑	↓	↓	↓	↓	↓	
NaF	↘	↑	↘	↘	↘	↑	↑	↓
Al ₂ O ₃	—	↓	↓	↗	↓	↓	↘	↓
Temper.	↑	↑	↓	↓	—	↑	↓	↑

1.1.2 Resistência Elétrica das Cubas

A resistência é o parâmetro que determina a estabilidade da cuba. Quando a resistência varia pouco, a cuba está estável. A resistência elétrica da célula é influenciada por (GRJOTHEIM e WELCH, 1988):

- Concentração de alumina;
- Composição do banho;
- Quantidade de alumina precipitada no fundo da cuba;
- Nível de metal contido na cuba;
- Distância entre o catodo e o anodo.

O cálculo da resistência é feito pela equação abaixo:

$$R = (V - E) / I \quad 1.2$$

Onde V é a tensão da cuba em Volts, I a corrente em Ampere e E é a tensão necessária para dar início ao processo. Ela é formada pela tensão de decomposição da alumina e pela sobre-tensão existentes no anodo e catodo. Em geral, os valores da sobre-tensão no anodo e catodo são, respectivamente, 0,48V e 0,05V (MENIUK, 1995; GRJOTHEIM e WELCH, 1988). A tensão de decomposição a 1000°C é 1,18V (GRJOTHEIM e WELCH, 1988).

Na maioria das indústrias um computador mede a resistência das cubas, sendo que toda cuba tem a sua faixa de controle de resistência. Quando ela está fora dos limites, o computador altera a distância anodo-catodo (distância AC) para que ela retorne a faixa de controle. O controle da resistência através da distância AC é feito movimentando-se o barramento anódico.

1.1.3 Sistema de Alimentação de Alumina

Existem várias formas de alimentar a cuba com alumina. Nas fábricas mais antigas isto é feito pela parte lateral da célula eletrolítica (side brake), através da quebra de uma crosta solidificada (GRJOTHEIM e KVANDE, 1986; BURKIN, 1987). A composição química desta crosta depende do tipo de alumina usada e da temperatura de operação da célula (GRJOTHEIM e WELCH, 1988). Tipicamente ela contém aproximadamente 30% de banho e o remanescente sendo alumina. A maior parte da alumina da crosta apresenta uma forma cristalográfica diferente da alumina adicionada em forma de pó. Ela sofre uma transformação de fase gama para forma alfa. Esta transformação se dá pela ação do banho e de vapores

provenientes da cuba. Esta alumina alfa torna mais difícil a dissolução da crosta, além disso, a crosta precisa ser fundida e ela diminui a área de contato da alumina com o eletrólito (GRJOTHEIM e WELCH, 1988).

Em células mais modernas a alumina é adicionada automaticamente, ao longo de uma linha central. Este sistema é conhecido como “break-and-feed”. Ele consiste de uma barra de aço, localizada na parte central da cuba, cuja função é quebrar a crosta enquanto a alumina é adicionada diretamente no eletrólito. A operação da barra para quebrar a crosta é feita através de ar comprimido. O intervalo de tempo em que a alimentação é realizada varia de 20 a 90 minutos (GRJOTHEIM e WELCH, 1988; GRJOTHEIM e KVANDE, 1986). As principais desvantagens das técnicas de alimentação descritas acima são as grandes flutuações da concentração de alumina ao longo do banho e da temperatura do eletrólito. As mudanças na temperatura são causadas pelas grandes quantidades de alumina adicionada. As dificuldades de manter a cuba dentro da faixa de controle são bem mais difíceis do que no sistema descrito abaixo (BURKIN, 1987).

A mais recente inovação na alimentação de alumina é um sistema denominado de “point feeding”. Ele possui, ao longo da linha central da cuba, de 1 a 5 alimentadores. Estes alimentadores têm ponteiras (quebra-crosta) responsáveis em fazer pequenos furos (de 6 a 10 cm de diâmetro) na crosta. Então a alumina é adicionada nestes orifícios em um curto intervalo de tempo (de 1 a 2,5 minutos) e em pequena quantidade (de 1 a 5 quilogramas em cada ponto de alimentação) como a frequência de alimentação é alta, os furos feitos na crosta tendem a ficar abertos, facilitando a saída de gases (MENIUK, 1995; GRJOTHEIM e KVANDE, 1986; WALKER et al., 1995).

A principal razão das modernas fábricas preferirem o “point feeding” é devida a melhor dissolução de alumina. Com este sistema chega-se próximo de uma alimentação contínua, ou seja, menor tendência de formar “lama” ou efeito anódico (BURKIN, 1987; WALKER et al., 1995 ; ARCHER, et al., 1987). Além disso, as variações térmicas são menores.

Em geral podemos dizer que o número de alimentadores e suas posições dependem do tamanho e design da célula. Outra estimativa é que existe um alimentador para cada 50kA de corrente da célula. De uma forma mais criteriosa, a quantidade de alimentadores na cuba será determinada por (WALKER et al., 1995; HOMSI, 1996):

a) Melhor dissolução da alumina. A quantidade não pode ser muito grande, senão gerará “lama”, nem pode ser muito pequena para evitar efeito anódico;

- b) Menores gradientes de concentração de alumina. Evitar que algumas regiões do banho possuam maiores teores de alumina que outras;
- c) Ser capaz de eliminar o efeito anódico. Quando ocorre o efeito anódico o sistema tem que aumentar a taxa de alimentação para exterminá-lo.

A ALUMAR utiliza o sistema de “point feeding”. A alimentação é feita através de três alimentadores. O tempo entre uma adição e outra não é igual em todas as cubas. Ele é estipulado conforme o comportamento da cuba ao longo do tempo, sendo reavaliado periodicamente (semanalmente) em função de diversas variáveis de processo da cuba em questão (RAMOS, 1995). Entretanto, em média a frequência aproxima-se de 140 segundos. Cada alimentador adiciona cerca de 1,7kg de alumina na cuba. Figura 1 da pagina 1 mostra uma célula com este tipo de alimentação.

1.1.4 Alumina

O primeiro estágio na produção do alumínio é a extração da alumina da bauxita. Isto é realizado através de um processo químico denominado de “Bayer”.

A alumina tem algumas funções na indústria de alumínio, as principais são:

- a) Matéria prima para o processo Hall-Héroult;
- b) Diminuir as perdas térmicas da cuba. Mistura-se ao banho formando uma crosta sobre a parte fundida, agindo como isolante térmico;
- c) Recobrir os anodos (prebaked) para prevenir a reação deles com o ar;
- d) Absorver os fluoretos emitidos pela sala de cubas.

1.1.5 Eletrodos

Tanto o anodo como o catodo das cubas são fabricados com carbono. Enquanto o anodo é um elemento sempre consumido na eletrólise de redução da alumina, os blocos de carbono que formam o catodo servem apenas de condutor elétrico e isolante térmico. A camada de alumínio líquido que está sobre os blocos catódicos também faz parte do catodo. As indústrias de alumínio no mundo consomem cerca de 8 milhões de toneladas de carbono por ano devido ao desgaste do anodo (MENIUK, 1995).

O anodo fica suspenso sobre o catodo, parcialmente submerso no banho. Nele verifica-se a queima do carbono que combina com o oxigênio proveniente da eletrólise da alumina. Para o anodo ter o desempenho operacional esperado, ele deve conter algumas propriedades e alguns

cuidados devem ser tomados. Abaixo seguem os principais (TSUBAKI, 1985; ZHANG et al. 1994):

- Alta condutividade elétrica;
- Ter bom isolamento, para não reagir com o ar;
- Baixa condutividade térmica;
- Alta resistência ao choque térmico e mecânico;
- Alta densidade;
- Baixa porosidade;
- Baixos níveis de impurezas;
- Base plana e horizontal;
- Ao ser trocado, o anodo novo deve manter-se no mesmo nível dos demais.

Na produção do alumínio, existem dois tipos de células eletrolíticas, Soderberg e prebaked. As células são diferenciadas pelo design e processo de fabricação do anodo (ZHANG, 1994).

Os dois tipos de cubas eletrolíticas têm como fundamento a utilização de carbono para a reação eletrolítica, porém este carbono pode vir em forma de pasta anódica ou blocos de carbono pré-cozidos, daí a origem para o nome do segundo tipo – Prebake.

Nesse tipo de processo, os blocos de carbono passam por um processo intermediário entre sua fabricação (moldagem do bloco, conhecido como anodo verde) e seu uso na cuba eletrolítica – esta etapa intermediária é conhecida por cozimento de anodos.



Figura 4 Anodos pré-cozidos.

Em plantas Sodeberg, esta etapa é realizada dentro da própria cuba, onde a pasta anódica é colocada ainda em seu estado primário, e o processo de cozimento se dá ao longo da sua utilização na cuba. Porém como a cuba opera em uma temperatura significativamente abaixo da considerada ideal para o alcance do potencial máximo de qualidade da pasta anódica, em termos de propriedades físico-químicas, o processo Sodeberg fica limitado em termos de rendimento na produção de Alumínio.

Por esta razão, a tendência mundial é a completa migração das plantas Sodeberg para plantas Prebake, onde os anodos são pré-cozidos em uma área conhecida como *Fornos de Cozimento de Anodos*. O objetivo principal do processo de cozimento de anodos é permitir atingir as melhores propriedades físico-químicas para o bloco de carbono, através de uma adequada relação tempo x temperatura, além de uma suave taxa de aquecimento.

Basicamente o processo de cozimento resume-se em um tratamento térmico onde o calor é transferido de forma indireta ao anodo de carbono, permitindo alterações na composição química e mudanças na estrutura dos grãos de carbono dentro do bloco. As Figura 5 e Figura 7 ilustram um forno de cozimento de anodos.

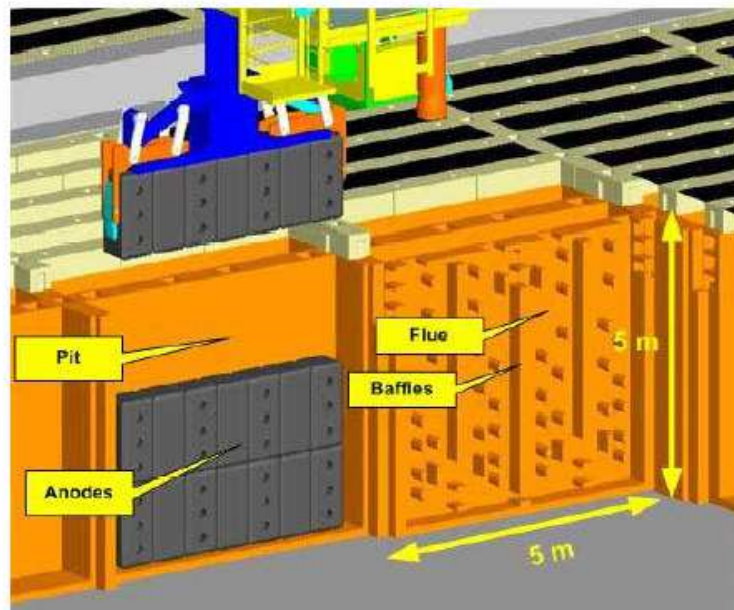


Figura 5 Esquema do forno de cozimento de anodos.

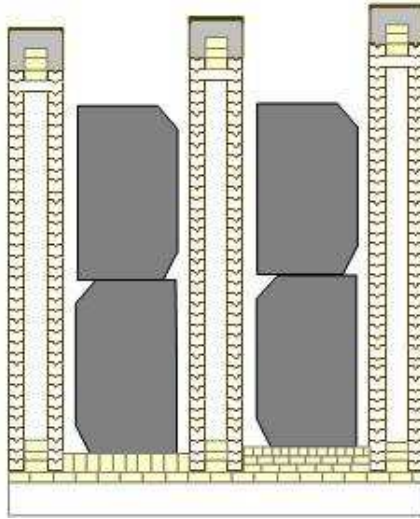


Figura 6 Vista lateral dos fornos de cozimento de anodos.



Figura 7 Forno de cozimento de anodos.

Nestes Fornos a carga (anodo verde) é colocada dentro de poços profundos, abertos na parte superior e envoltos por tijolos refratários. Em seguida, os anodos são cobertos com coque granulado (chamado coque fluido), de composição química e temperatura de calcinação diferentes do coque do anodo. Entre dois poços com anodos, existem câmaras fechadas por onde passam gases aquecidos para permitir aquecimento indireto do anodo pela parede refratária e pelo coque fluido. Os anodos normalmente passam entre 14 e 16 dias dentro desses poços, onde obedecem a uma curva de temperatura (ciclo de cozimento) garantida pela colocação de equipamentos móveis sobre estas câmaras de combustão, que injetam ar e combustível para geração de calor. Os gases gerados por este processo são captados por dutos de exaustão e lançados para a atmosfera através de chaminés com altura de cerca de 75 metros. Após o ciclo total de cozimento, os anodos são retirados dos poços e enviados a sala

de chumbamento, onde uma haste de cobre é colocada no anodo para permitir posicionamento dentro da cuba eletrolítica.

Uma cuba eletrolítica opera adequadamente com anodos com baixa resistência elétrica, aproveitando melhor a corrente elétrica para a eletrólise, alta densidade e conseqüentemente baixa permeabilidade ao ar, levando a um baixo consumo bruto de carbono, e adequada condutividade térmica, o que garante pleno balanço térmico do reator.

Estas características são determinadas em parte pela qualidade da matéria-prima usada, no caso coque de petróleo e piche de alcatrão, pelas propriedades de formação do bloco, especificamente densidade verde e teor de piche na formulação, e pelas condições de tratamento térmico, ou processo de cozimento do anodo.

Para se alcançar uma satisfatória qualidade para o anodo cozido, os parâmetros do processo de cozimento devem ser previamente estudados e definidos em função de diversas condições de operação, projeto e matéria-prima utilizados. Os principais parâmetros do processo de cozimento são: ciclo de produção (parâmetro que determina o tempo total de cozimento), taxa de aquecimento, configuração e posicionamento dos equipamentos para elevação da temperatura e temperatura máxima de patamar.

O anodo, conforme dito anteriormente é o eletrodo positivo. A corrente atravessa-o e em seguida, passa pelo banho eletrolítico para decompor a alumina. Segue através do leito de metal líquido, daí para o carbono do catodo e sai por barras de aço (coletoras) nele engastadas (Ver Figura 8). Vale lembrar que as cubas são ligadas em série.

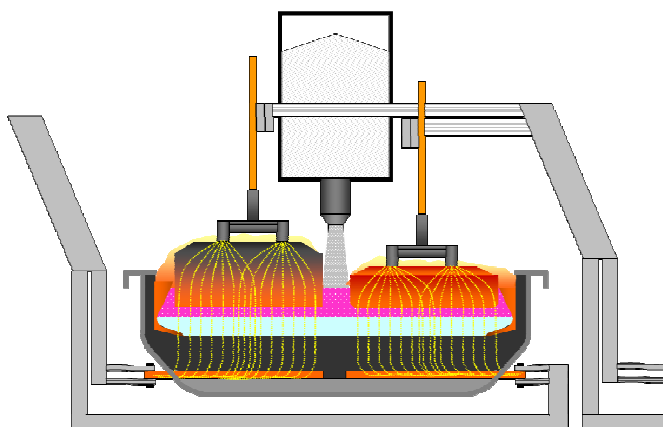


Figura 8 Passagem de corrente em uma cuba eletrolítica

Os principais fatores que contribuem para o consumo do carbono do anodo são os seguintes (GRJOTHEIM, 1986; TSUBAKI, 1985:

a) Reação eletroquímica: Nesta reação ocorre o consumo da maior parte do carbono do anodo, cerca de 75%. Estequiometricamente são usados 333 kg de C / t Al;

b) Reoxidação do alumínio: Por causa desta reação (ver reação 2) mais carbono é consumido para produzir uma quantidade de alumínio que já havia sido produzido, gerando perda de eficiência. Aproximadamente 8% do carbono do anodo é gasto nesta reação;

c) Reação do anodo com o oxigênio do ar: Muitos devem ser os cuidados para que o anodo não fique exposto ao ar. As perdas vão depender das condições da cobertura do anodo e da presença de impurezas, principalmente V e Ni, pois são fortes catalisadores da reação. Estima-se que 8% do carbono do anodo é perdido nesta reação;

d) Formação de pó de carbono: Muitas vezes observa-se a presença deste pó sobrenadando o banho eletrolítico. Trata-se de partículas finas de C, que se desprendem do anodo e que não reagem com os gases. O carbono do piche (aglutinante), que forma o anodo, é mais reativo que os grãos de coque. Assim, o piche é preferencialmente consumido durante a eletrólise. As partículas de coque são consumidas mais lentamente, as vezes desprendem-se do anodo, formando os pós de carbono. Por volta de 3% do carbono do anodo é perdido em forma de pó;

e) Reação das laterais do anodo com CO₂ emitido da cuba: A 1010°C o CO₂ reage com o C (ver equação 1.3). Como a célula, normalmente, trabalha em temperaturas inferiores a 1000°C, é pequena a perda de carbono devido esta reação, aproximadamente 5%.



A Tabela 3 mostra um resumo dos principais fatores que contribuem para o consumo do anodo com seus percentuais.

Tabela 3 Contribuições do consumo do carbono do anodo (GRJOTHEIM e KVANDE, 1986).

Mecanismos	Consumo do anodo (%massa)	
	Prebaked	Soderberg
$1/2 Al_2O_3 + 3/4C \rightarrow Al + 3/4CO_2$	66-76	58-66
Reação básica:		
Perdas de carbono:		
$C + O_2 \rightarrow CO_2$ ou $2C + O_2 \rightarrow 2CO$	8-15	4-5
$CO_2 + C \rightarrow 2CO$	5-6	7-8
Reoxidação do Al	7-8	8-10
Reação com impurezas e perda por butts		
(anodos gastos)	3,5-4,5	2-3
Consumo teórico de carbono (kg C/kg Al)	0,333	0,333
Consumo real de carbono (kg C/kg Al)	0,4-0,45	0,5-0,55

A parte catódica da cuba é uma carcaça de aço revestida internamente com uma camada de material isolante e uma camada de blocos de carbono. O catodo é o eletrodo negativo ele é trocado após alguns anos, em geral após 5 anos. As principais características que deve ter o catodo são as seguintes (TSUBAKI, 1983; ZHANG et al., 1994):

- alta condutividade elétrica;
- alta resistência ao choque térmico;
- baixa condutividade térmica;
- bom contato elétrico com a barra coletora;
- baixa porosidade;
- molhabilidade pelo alumínio fundido;
- alta resistência a penetração do sódio e eletrólito;
- resistência à abrasão.

A redução na vida do revestimento catódico é devida, geralmente, a interação dele com o eletrólito e produtos da eletrólise, principalmente o sódio (ZHANG, 1994).

1.2 Descrição do Problema

O processo de cozimento de anodos consiste no aquecimento indireto do bloco de carbono pelo calor gerado dentro das câmaras de combustão. Este calor é proveniente da queima de combustível (podendo ser óleo Diesel, pesado ou gás natural), injetado por equipamentos que se movem sobre os anodos a cada ciclo de produção. Este ciclo de produção reflete a velocidade com que cada equipamento é movido sobre os anodos que se localizam dentro dos poços, determinando assim a produção total de blocos de um determinado forno. Desta forma, quanto maior a necessidade de produção, menor será o tempo de cozimento, pois os equipamentos serão movidos mais rapidamente e os anodos retirados com um tempo total de cozimento menor.

A determinação da demanda de anodos varia em função do ciclo de vida do anodo dentro da cuba. Normalmente estabelece-se um ciclo de vida que permite enviar um anodo com um determinado peso (cerca de 1.050 kg no caso da Alumar) e retornar com uma parte dessa massa (chamada butts), de tal forma que a massa retornada garanta pelo menos 20% da formulação de um novo anodo. Esta massa de butts é necessária para atingir o mínimo de resistência mecânica para o anodo verde durante a formação do novo bloco. A equação que descreve a demanda de blocos anodos por dia (P BA) é a seguinte:

$$P \cdot BA = \frac{\text{número de anodos na cuba} \times \text{número de cubas em operação} \times 24}{\text{ciclo de vida do anodo na cuba}} \times \text{taxa de falha}$$

Com a demanda de anodos calculada, calcula-se o ciclo de produção necessário para atender a esta demanda, ou seja, define-se a velocidade de movimentação dos equipamentos sobre os anodos.

O ciclo de produção é definido levando-se em conta a quantidade de fornos em operação, a quantidade de equipamentos disponíveis para cada forno e a quantidade de anodos colocados dentro de cada poço.

Cada forno opera com conjuntos de equipamentos que movimentam-se sobre os anodos de acordo com o ciclo de produção. Estes conjuntos de equipamentos são chamados “fires”. Cada fire consiste em uma unidade de produção autônoma, composta por equipamentos que injetam combustível e ar dentro das câmaras de combustão, e os exaustores que captam os gases. A Figura 9 mostra um desenho esquemático de um forno.

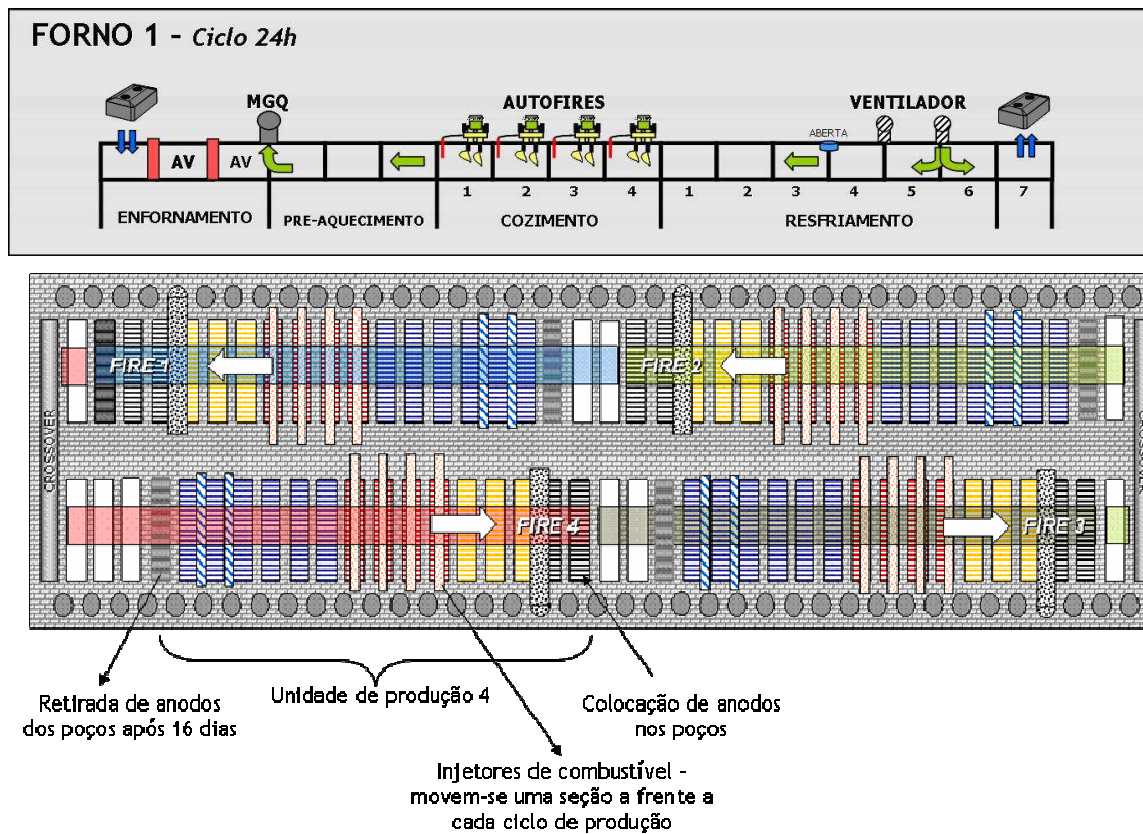


Figura 9 Esquema de um forno de cozimento de anodo.

Com estes aspectos de produção definidos pela demanda de blocos pela cubas, criando restrições em termos de otimização, as alterações de processo tornam-se ainda mais significativas.

A partir deste ponto, o processo de cozimento pode ser alterado pela temperatura de patamar, tempo sob patamar e quantidade de equipamentos sobre os anodos. Vale lembrar que o objetivo principal é encontrar o ponto ótimo entre tempo e temperatura, apesar das restrições impostas por questões de produção. Porém, a busca pelo ponto ótimo é fundamentada não somente pelo comportamento teórico das propriedades físico-químicas em função da curva de cozimento, mas também pelas limitações impostas pela não uniformidade de temperatura dentro dos poços. Este fator torna-se o principal problema na otimização de um processo de cozimento de anodos, atingir o ponto ótimo de tempo x temperatura levando-se em conta sua variabilidade quando aplicada na prática.

Pela **Erro! Fonte de referência não encontrada.** pode-se observar um perfil comum de temperatura dentro de um poço de anodos. Pode-se observar no perfil térmico do poço que as regiões dos cantos são mais frias que a região central, em função da maior perda de calor pelo topo e pelo fundo. Em fornos mais modernos, esta variação gira em torno de 50°C, porém em fornos como os da Alumar, o Delta T pode chegar a 150°C. Fornos mais antigos, da década de 70 este valor chegava a 250°C.

Em termos de qualidade de anodo, isso pode tornar-se dramático para o desempenho do anodo na produção de Alumínio, principalmente em questões relacionadas ao balanço térmico da cuba. Uma variação acima de 150°C faz com que propriedades como condutividade térmica e resistência elétrica adquiram o mesmo comportamento e aumentem suas variabilidades, comprometendo a estabilidade da cuba.

Diante desses aspectos, a previsibilidade em termos de distribuição de temperatura em função dos testes e modificações nos parâmetros de processo com o objetivo de aperfeiçoá-lo, torna-se fundamental para manutenção da estabilidade na produção de Alumínio, pois ela é diretamente afetada em função de modificações no processo de cozimento.

1.3 Objetivos do Trabalho

O objetivo deste trabalho é estudar os impactos do ciclo de cozimento, incluindo tempo total de cozimento, tempo sob patamar máximo de temperatura, taxa de aquecimento do anodo e temperatura de patamar, sobre a distribuição de temperatura dos anodos dentro dos poços nos fornos de cozimento, pois como os poços são relativamente profundos (cerca de 5 metros) e compridos (cerca de 6 metros), a temperatura pré-definida como target não é atingida em todas as regiões do poço, levando a uma não uniformidade no grau de cozimento de cada anodo, e criando distorções na distribuição da corrente elétrica pelos anodos dentro das cubas.

A proposta desta dissertação faz parte de um estudo de otimização maior em andamento nos Fornos da Alumar. Há em andamento um projeto com o objetivo de realizar o modelamento completo do processo de cozimento, onde todas as variáveis de processo estão sendo estudadas individual e conjuntamente. O resultado deste projeto será um modelo validado experimentalmente que mostre a influência de cada parâmetro de processo sobre a distribuição de temperatura nos poços de anodos. Este modelo irá rodar em CFX e permitirá prever o comportamento da distribuição de temperatura em função de alterações nos parâmetros de processo. Isso permitirá aumentar a velocidade e a assertividade nos testes propostos pela engenharia de processo para otimizar o processo de cozimento.

Como resultado é esperado um modelo validado experimentalmente, onde todas as características do processo de cozimento, tanto do aspecto de processo quanto de projeto, estejam inseridas. Isso significa ter a possibilidade de trabalhar as informações contidas no modelo e permitir à engenharia de processo simular as alterações de parâmetros de processo no sentido de buscar otimizar a distribuição de temperatura dos anodos dentro dos poços.

1.4 Organização da Dissertação

Esta dissertação está dividida em 6 capítulos, como descrito abaixo:

- No capítulo 1 são apresentados descrição de todo o processo de produção de alumínio, assim como a descrição do problema e os objetivos do trabalho.
- O capítulo 2 mostra toda a fundamentação da dissertação, .
- O capítulo 3 desenvolve toda a modelagem matemática que é utilizada na solução do modelo. Ele mostra o desenvolvimento das equações de conservação de massa, energia e quantidade de movimento.
- O Capítulo 4 descreve a discretização utilizada para a solução as equações descritas na modelagem matemática.
- O capítulo 5 mostra os resultados das simulações para a influência da geometria e influência do ciclo de cozimento no campo de temperatura do anodo.
- Finalmente o capítulo 6 conclui o trabalho com base nos resultados obtidos, além de sugestões para a continuação desta pesquisa. .

2 Fundamentação Teórica

O termo combustão é designado, segundo (LIXING, ,1993), como uma reação química (reação de oxidação) acompanhada por liberação de calor e emissão de um feixe de luz. Estas reações, em primeiro lugar, são consideradas como a oxidação de combustíveis sólidos (não-metais ou metais), combustíveis líquidos ou gasosos, porém reações de dissociação como as de cloração, fluoração e nitração, podem também ser consideradas como reações de combustão, se elas tiverem alto efeito térmico.

O primeiro resultado publicado sobre a interação combustão e o tipo de escoamento (turbulento ou laminar) foi realizado por (DAMKÖHLER, , 1939) 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 para um regime laminar permaneceu constante em função do número de Reynolds, enquanto que para o regime turbulento a velocidade de queima aumenta com o incremento no número de Reynolds.

Em fornos de cozimento de anodos, a obtenção de calor se dá através da combustão obtida por meio da injeção do combustível e do oxidante para o interior do forno e pela promoção de uma mistura entre estes reagentes. O fenômeno de combustão é o resultado das interações complexas de processos físico-químicos, na qual o seu estudo envolve numerosas disciplinas tais como termodinâmica, cinética química, fluidodinâmica, etc. Com isto, uma vasta quantidade de material sobre o assunto combustão pode ser encontrada, desde o regime laminar até a combustão turbulenta provida de intensos movimentos giratórios (*swirl*). Diante de tal complexidade e amplitude de materiais disponíveis que podem ser consultados que envolvem combustão, é apresentado a seguir uma revisão bibliográfica sucinta, procurando estabelecer uma visão global dos estudos que foram e que vem sendo realizados sobre combustão e CFD em fornos de cozimento de anodos.

Nos últimos 5 anos este processo de cozimento de anodos passou a ser estudado de forma mais aprofundada, tendo como base simulações iniciais em softwares computacional como o CFX. Os trabalhos mais avançados foram desenvolvidos por empresas especializadas em simulações computacionais como a PCE Engenharia e a suíça R&D Carbon.

Nesses trabalhos, foram realizadas simulações fluido-dinâmicas 3D em fornos de cozimento, com validação do modelo em campo através de experimentos práticos. As principais variáveis

estudadas são as mesmas desta dissertação, como temperatura máxima de cozimento, geometria da câmara e a influência do tempo de cada ciclo de cozimento; tendo como resultado o perfil de temperatura e Delta T da câmara de cozimento.

Os primeiros trabalhos tinham como meta principal desenvolver uma geometria de câmara que permitisse alcançar o melhor resultado em termos de perfil de temperatura, deixando a câmara o mais uniforme possível. A Figura 10 apresenta um exemplo de geometria para a câmara por onde o ar quente escoava.

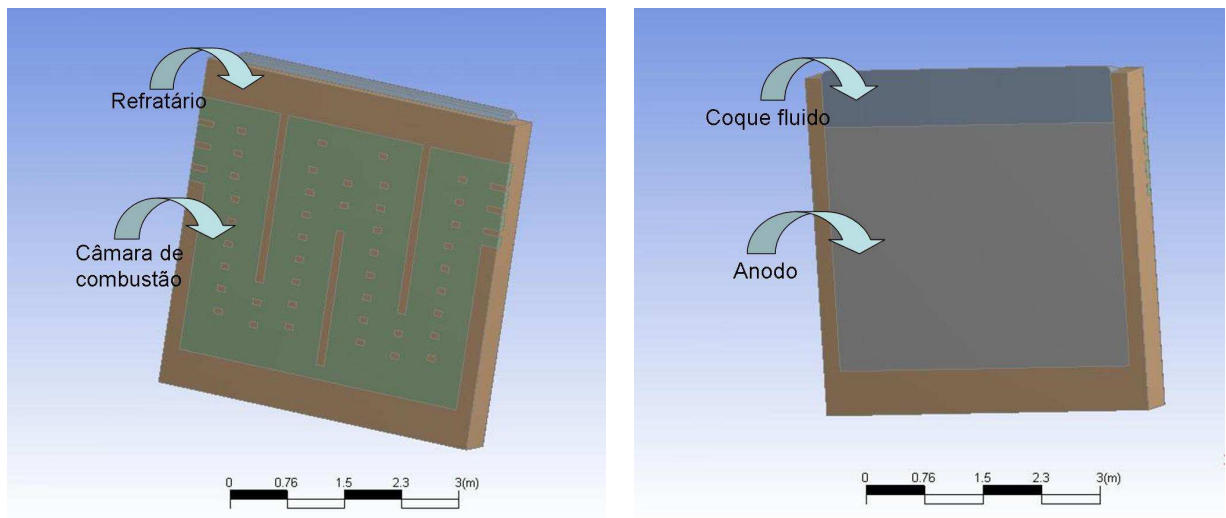


Figura 10 Exemplo de geometria de câmara.

Desta forma foram realizadas modificações na geometria, tais como simulações das posições de tijolos intermediários que pudessem melhorar o fluxo de gases e tempo de residência reduzindo os pontos frios dentro da câmara. A Figura 11 apresenta um exemplo de perfil de velocidade.

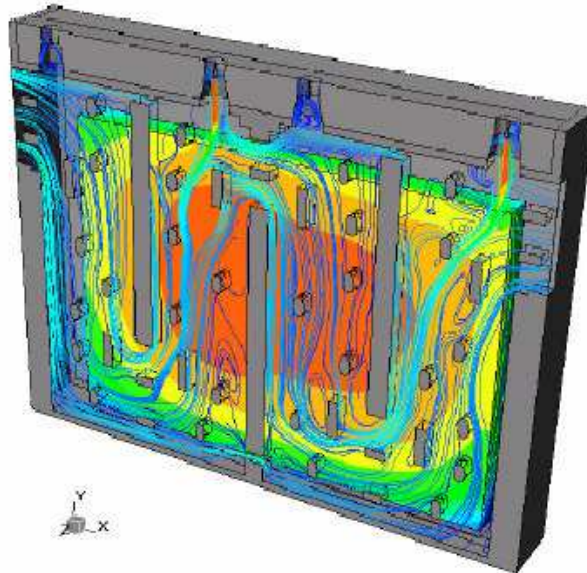


Figura 11 Exemplo de perfil de velocidade.

Os trabalhos também consideraram os efeitos do tempo de cozimento e temperatura máxima sobre o perfil de temperatura, independente da geometria utilizada. Alguns desenvolvimentos foram mais a fundo, estudando os detalhes da geometria do forno como um todo, desde as seções retas até as curvas do crossover, que é a região onde os gases retornam e fluem para o outro lado do Forno (em fornos do tipo Open Ring). Nessa região há uma perda excessiva de calor e pressão, impactando o perfil de temperatura das câmaras seguintes. Por essa razão um estudo detalhado é necessário, tal qual foi realizado no trabalho (GENDRE, 2007).

3 Modelagem Matemática

Neste Capítulo apresentam-se os modelos matemáticos utilizados nas Simulações Numéricas realizadas neste trabalho. O Capítulo apresenta as equações fundamentais da fluidodinâmica no formato como elas são tratadas no pacote computacional CFX. Portanto, apresenta todas as equações fundamentais de transporte: massa, energia e movimento (*momentum*).

Também são apresentadas as equações extras para obter o fechamento do modelo proposto, tais como as equações de turbulência e das espécies químicas envolvidas. O leitor também encontrará o modelo de combustão adotado bem como o de radiação térmica envolvido no processo de transferência de calor.

3.1 Formulação dos Modelos

3.1.1 Uma visão geral

A resolução de qualquer problema físico requer a habilidade da criação do modelo matemático correspondente. O modelo matemático deve ser tal que possa ser resolvido com tempos de computação não-proibitivos e que os resultados obtidos representem o fenômeno físico em questão. Obviamente, atingir este objetivo não é tarefa fácil!

Para obtenção do sistema de equações de massa, movimento (*momentum*), energia e conservação de escalares, a decisão importante a ser tomada é com relação ao nível na qual os balanços de conservação são realizados. Citando os extremos, os balanços de conservação podem ser feitos tanto em nível molecular (grandeza de nm (10^{-9} m) e pm (10^{-12} m), originando uma equação para cada molécula, como sobre os volumes de controle a ordem de grandeza de μm (10^{-6} m), que podem até, em determinadas direções, coincidir com o domínio de solução. Nesses extremos, varia muito a complexidade dos métodos numéricos adequados para cada situação. Obviamente, a solução das equações dentro do nível molecular é impraticável. Atualmente os modelos que resolvem os problemas de transferência de calor e massa em fluidos de interesse da engenharia estão em ordem de tempo e espaço da seguinte maneira:

- O tempo médio sobre os quais os balanços de conservação são realizados, t , é muito maior que a escala de tempo para turbulência, t_t , ou seja, $t \gg t_t$;
- O comprimento médio sobre os quais os balanços de conservação são realizados, L , também é muito maior que a escala de comprimento para turbulência, L_t , ou seja, $L \gg L_t$.

3.2 Equações de Conservação

A descrição de um fluido em movimento obedece à três leis físicas que são fundamentais e que regem a fluidodinâmica, conforme exposto pela Tabela 4.

Estas três leis básicas fundamentais, de forma análoga, podem ser trabalhadas através de balanços em volumes de controle infinitesimais, de forma a obter a respectiva Equação de transporte para cada princípio físico. Tais equações, depois de obtidas, podem ser utilizadas tanto em regime laminar quanto em regime turbulento. Entretanto sabe-se que, para propósitos de cálculos na engenharia, resolver estas equações na forma em que são apresentadas é próximo do impraticável pelo simples fato da tecnologia atua 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*).

Tabela 4 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

Nas seções seguintes, as equações de conservação média da massa, movimento, energia e espécies químicas são derivadas. Primeiramente serão visualizadas as equações para as quantidades instantâneas, passando em seguida para as equações médias pelo método da média temporal (*Reynolds Average*).

3.2.1 Conservação da Massa

A Equação que representa a conservação instantânea da massa total, 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:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j) = 0 \quad (3.1)$$

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.

De forma a obter a formulação média da Equação (3.1) da continuidade, deriva-se a mesma introduzindo o conceito de médias temporais, resultando na seguinte relação:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} U_j) = 0 \quad (3.2)$$

3.2.2 Transporte da Quantidade de Movimento

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

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho U_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_i U_j) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho f_i \quad (3.3)$$

Os três termos do lado direito da Equação (3.3) representam as componentes das forças devido a pressão P , o tensor viscoso τ_{ij} , e as forças de campo f_i , respectivamente. Na derivação das equações médias para um fluido newtoniano hipotético, o tensor tensão é dado por:

$$\tau_{ij} = -\mu_b \delta_{ij} \frac{\partial U_l}{\partial x_l} - \mu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.4)$$

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 $i \neq j$).

Efeitos da força de campo são importantes quando modelam-se escoamentos com meios porosos, onde um termo fonte na Equação do movimento deve ser incluído. Ainda, para escoamentos onde efeitos da coriolise e força centrípeta são relevantes, também existe uma contribuição destas forças em f_i , casos estes que não existem neste trabalho.

Aplicando a média temporal na Equação fundamental (3.3), obtém-se a Equação (3.5):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho U_i}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho U_i U_j}) = -\frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\tau_{ij}} + \overline{\rho u_i u_j}) \quad (3.5)$$

Quando se aplica a média na Equação (3.3), 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.

Este tensor extra é conhecido como tensor tensão de Reynolds e apresentam o seguinte equacionamento:

$$\tau_{ij} = -\overline{\rho u_i u_j} \quad (3.6)$$

Quanto a média da tensão viscosa $\overline{\tau_{ij}}$, presente na Equação (3.5), tem-se a Equação (3.7):

$$\overline{\tau_{ij}} = -\mu \left(\frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U_j}}{\partial x_i} \right) \quad (3.7)$$

3.3 Conservação da Energia

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 :

$$\frac{\partial(\rho H)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_j H)}{\partial x_j} = \frac{\partial P}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_j}(U_i \tau_{ij} + Q_j) + \rho U_i f_i \quad (3.8)$$

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 (3.8) 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. Este último termo é negligenciado na derivação da Equação da média da conservação da energia.

A entalpia total esta relacionada a energia total, E , a energia interna, e , a entalpia estática, H , da seguinte maneira:

$$H = E + \frac{P}{\rho} = \frac{P}{\rho} + \frac{1}{2}U_i U_j + e \quad (3.9)$$

onde

$$H = h + \frac{1}{2}U_i U_j \quad (3.10)$$

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

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} = \frac{\partial(\rho U_j h)}{\partial x_j} + \frac{\partial P}{\partial t} + U_j \frac{\partial P}{\partial x_j} - \tau_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial Q_j}{\partial x_j} \quad (3.11)$$

Aplicando a Lei de Fourier, o fluxo de calor Q_j , no lado direito das Equações (3.8) e (3.11) é dado por:

$$Q_j = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \quad (3.12)$$

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 :

$$h = C_p T \quad (3.13)$$

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 (3.8) e (3.11) podem ser negligenciados, levando a formulação da Equação da energia para energia total e entalpia estática, sendo respectivamente:

$$\frac{\partial(\rho H)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j H) - \frac{\partial Q_j}{\partial x_j} \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j h) - \frac{\partial Q_j}{\partial x_j} \quad (3.15)$$

A média temporal da Equação da energia, representada pelas Equações (3.14) e (3.15), resultam nas seguintes equações de conservação para a energia média total Equação (3.16) e para a entalpia estática Equação (3.17):

$$\frac{\partial(\rho \bar{H})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \bar{U}_j \bar{H}) = -\frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{Q}_j + \rho \overline{u_j'' H''}) \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial(\rho \bar{h})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \bar{U}_j \bar{h}) = -\frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{Q}_j + \rho \overline{u_j'' h''}) \quad (3.17)$$

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

$$\bar{H} = \bar{h} + \frac{\overline{U_i U_i}}{2} = \bar{h} + \frac{\overline{U_i U_i}}{2} + \frac{\overline{u_i'' u_i''}}{2} = \bar{h} + \frac{\overline{U_i U_i}}{2} + k \quad (3.18)$$

$$H'' = h'' + \overline{U_i u_i''} + \frac{u_i'' u_i''}{2} - k \quad (3.19)$$

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

3.4 Conservação das Espécies Química

A Equação (3.20) da conservação das espécies C , pode ser derivada, na sua forma instantânea, como segue:

$$\frac{\partial \rho C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j C) = \frac{\partial J_i}{\partial x_j} + S \quad (3.20)$$

Onde ρ é a massa específica, C é a concentração da espécie, 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 (3.20) 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 (3.20) pode ser relacionado através da segunda Lei de Fick:

$$J_i = -\Gamma \frac{\partial C}{\partial x_j} \quad (3.21)$$

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 (3.20) gera um termo de fluxo turbulento desconhecido (chamado de *Fluxo de Reynolds*) quando se aplica a média temporal dando origem a seguinte Equação (3.22):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{C}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \bar{C} U_j) = -\frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{J}_i + \rho \overline{c'' u_j''}) + \bar{S} \quad (3.22)$$

3.5 Generalização das Equações de Transporte para escalares

A Equação (3.22) pode ser agrupada de uma maneira genérica para tratamento de qualquer variável escalar conforme a Equação 3.23, para transporte de escalares:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{\Phi}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \bar{\Phi} U_j) = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\Gamma \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial x_j} + \rho \overline{\Phi'' u_j''} \right) + \bar{S}_\Phi \quad (3.23)$$

onde ρ representa a fração mássica, Φ o escalar a ser transportado, U_j a velocidade de escoamento, Γ é a difusividade do escalar, S_Φ é o termo fonte/sumidouro do escalar, e $\overline{\rho \Phi'' u_j''}$ o termo de fluxo turbulento que deve ser computado através de modelos de turbulência.

3.6 Turbulência

Neste trabalho de combustão em fornos de cozimento de anodos, o fenômeno de turbulência deve ser modelado devido aos grandes gradientes de velocidade e densidade presentes na câmara de combustão. A reação de combustão afeta a turbulência devido a troca térmica que por sua vez, provoca variação na densidade. Em contrapartida, a turbulência pode afetar a taxa de reação pela intensificação das misturas de reagentes e produtos. Em geral, a taxa de reação, em escoamentos laminares, é determinada pela mistura à nível molecular, enquanto que em escoamentos turbulentos a taxa de reação é não somente afetada por mistura à nível

molecular, más também pela mistura turbulenta causada pelo movimentos aleatórios dos turbilhões (LIXING, , 1993).

O fenômeno de turbulência consiste de flutuações no campo de escoamento em relação a tempo e espaço. É um processo complexo, principalmente devido ser tridimensional, transiente e composto de muitas escalas. Este fenômeno ocorre quando as forças de inércia do fluido tornam-se significativas quando comparadas com as forças viscosas sendo caracterizado em altos números de Reynolds.

Turbulência é um dos mais complexos problemas na mecânica dos fluidos. Diferentes aproximações são usadas para o seu entendimento em problemas de engenharia. A maneira mais simples de reproduzi-lo é fazer com que a então chamada viscosidade turbulenta ou difusividade turbulenta seja como uma propriedade constante, a qual foi muito utilizada para predição de escoamentos em combustores. Por muitos anos, o método integral baseado em velocidade empírica e perfis de temperatura foi adaptado em escoamentos tipo jato. Obviamente, um tratamento mais rigoroso é necessário para predizer escoamentos turbulentos complexos na engenharia, tais como escoamentos tridimensionais recirculantes ou giratórios (*swirling*) onde a viscosidade turbulenta não é constante.

A aproximação fundamental para estudos de turbulência é conhecida por *Direct Numerical Simulation* (DNS) que consiste em resolver as equações de Navier-Stokes com tamanho de malha de origem de grandeza das escalas de Kolmogorov sem usar nenhum modelo de turbulência. Entretanto, o DNS necessita de uma considerável capacidade computacional que ainda é impraticável em problemas práticos de engenharia. Uma alternativa é o *Large-Eddy Simulation* (LES), que resolve as equações em tamanho de grade dos grandes turbilhões, mas ainda necessita modelar as pequenas escalas de turbulência. Atualmente, com a utilização de processamento paralelo (*Parallel Virtual Machine-PVM*) o LES vem sendo amplamente utilizado em problemas de engenharia.

Para a maioria dos problemas práticos de engenharia, no entanto, não é necessário resolver os detalhes das flutuações turbulentas para se representar um escoamento, sendo somente necessário os efeitos da turbulência no escoamento médio. Para tal, utilizam-se os modelos de turbulência estatísticos baseados nas equações da média temporal de Reynolds.

Os modelos de turbulência, em bases estatísticas, modificam a Equação de Navier-Stokes pela introdução da média temporal (*Reynolds averaging*) produzindo as equações de *Reynolds Averaged Navier-Stokes* (RANS) que são as Equações (3.2), (3.5), (3.16) e (3.23), expostas anteriormente.

A idéia básica de uma modelagem de turbulência é simular um termo desconhecido de alta ordem usando uma correlação de baixa ordem ou propriedades médias do fluido (LIXING, , 1993).

Simulações empregando os modelos de turbulência estatísticos além de serem representativos dos problemas encontrados na engenharia, reduzem enormemente o esforço computacional quando comparado ao DNS. No entanto, a RANS introduz termos desconhecidos que contém produto de quantidades flutuantes que agem como tensores adicionais ao fluido. Estes termos são chamados de *tensores de Reynolds*.

Os tensores de Reynolds precisam ser modelados pela adição de uma Equação adicional de quantidade conhecida para obter o fechamento do problema, ou seja, ter um número suficiente de equações para que o problema seja possível de ser resolvido. Esta Equação adicional necessária para “fechar” o problema é quem define o tipo de modelo de turbulência (GUIA CFX, , 2003).

Quando se aplica o método da média temporal na Equação (3.1) da continuidade para obter a Equação (3.2), é possível observar que não houve modificações nesta última. O mesmo fato não acontece quando se aplica o método da média temporal na Equação (3.3) de movimento para obter a (3.5) e na Equação (3.8) da energia para obter a (3.16). Nestas duas últimas equações, surgiram termos de fluxos turbulentos adicionais ao fluxo difusivo molecular. Estes são os **tensores de Reynolds**, $\overline{\rho u_i'' u_j''}$, referente a Equação de transporte de movimento, e o **fluxo de Reynolds**, $\overline{\rho u_i'' \Phi''}$, referente a Equação de transporte de escalares. Estes termos surgem dos termos convectivos não lineares nas equações instantâneas após aplicar o método da média temporal.

3.7 Modelos de Turbulência

Um modelo de turbulência é uma equação constitutiva utilizada que permita fechar a resolução das Equações (3.2), (3.5) e (3.23). Para a maioria dos problemas de engenharia não é necessário resolver os detalhes das flutuações turbulentas. Somente os efeitos da turbulência no escoamento médio são suficientes, em particular, para expressar os tensores de Reynolds $\overline{\rho u_i'' u_j''}$ e o transporte de fluxo turbulento de escalares conhecidos como fluxos de Reynolds $\overline{\rho u_i'' \Phi''}$. Para que um modelo de turbulência seja viável computacionalmente ele deve apresentar-se para uma larga faixa de aplicabilidade em problemas diversos, ser robusto,

simples e econômico computacionalmente. Os modelos de turbulência mais conhecidos, utilizados atualmente, estão presentes na Tabela 5.

Tabela 5 Modelos de Turbulência baseados nas Equações de Reynolds (média-temporal)

Modelo da zero-Equação (modelo do comprimento de mistura)
Modelo de duas equações $k - \varepsilon$ e o $k - \omega$
Modelo algébrico dos tensores
Modelo dos tensores de Reynolds

Os modelos clássicos utilizam as equações de Reynolds (*RANS-Reynolds Averaged Navier-Stokes*) e são de base estatística uma vez que é aplicado o procedimento da média estatística para obter as equações. Neste trabalho, é utilizado os modelos clássicos de duas equações $K - \varepsilon$ (LAUNDER e SPALDING, , 1974) e o modelo dos tensores de Reynolds (*Reynolds Stress Model*) desenvolvido originalmente por (CLARKE e WILKES, , 1989). Referências para maiores informações podem ser obtidas em (GARDE, 1994; LIXING, 1993; GUIA CFX, 2003).

O modelo clássico de duas equações $K - \varepsilon$ é baseado na idéia que existe um analogia entre ação dos tensores viscosos e tensores de Reynolds no escoamento. Ambos os tensores aparecem no lado direito da Equação de movimento (3.5) e na Lei de Newton da viscosidade o tensor viscoso é tido como sendo proporcional à taxa de deformação do elemento fluido sendo que, para fluidos incompressíveis, é dado pela Equação (3.24):

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \tag{3.24}$$

onde U_i e U_j são as velocidades instantâneas.

É observado experimentalmente, em escoamento incompressível isotérmico, que o fenômeno da turbulência diminui, a menos que o escoamento seja tensionado constantemente. Além disso, foi observado que os tensores Reynolds aumentam com o aumento da taxa de deformação do fluido. Esta foi a proposta de Boussinesq em 1887 em que os tensores de Reynolds seriam ligados a taxa média de deformação, como pode ser observado pela Equação (3.25):

$$\tau_{ij} = -\rho \overline{u_i'' u_j''} = \mu_t \left(\frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U}_j}{\partial x_i} \right) \tag{3.25}$$

onde $\overline{U_i}$ e $\overline{U_j}$ são os valores médio da velocidade de escoamento. Observa-se que o lado direito da Equação (3.24) de Newton é análogo ao da Equação (3.25).

Transporte de calor, massa e outras propriedades escalares são modeladas similarmente. A fórmula (3.25) mostra que o transporte de movimento $(\overline{\rho u_i'' u_j''})$ é tido como sendo proporcional ao gradiente da velocidade média $(U_i \text{ e } U_j)$, isto é, gradientes de movimento por unidade de massa. Por analogia, o transporte turbulento de um escalar, é feito como sendo proporcional ao gradiente do valor médio da quantidade transportada (hipótese da difusividade turbulenta), conforme a Equação (3.26):

$$-\overline{\rho u_i'' \phi''} = \Gamma_t \frac{\partial \overline{\phi}}{\partial x_i} \quad (3.26)$$

onde Γ_t é a difusividade turbulenta e ϕ é a propriedade escalar média transportada.

Desde que a transferência de movimento, calor e massa sejam devido ao mesmo mecanismo mistura-dissipativa, espera-se que o valor da difusividade turbulenta, Γ_t , seja próxima da viscosidade turbulenta, μ_t . Para distinguir esta difusividade turbulenta Γ_t entre mássica e calor, é introduzido o número de Schmidt (Sc) para massa e Prandtl (Pr) para calor que se relacionam com a viscosidade turbulenta, μ_t , através da Equação (3.27):

$$\sigma = \frac{\mu_t}{\Gamma_t} \quad (3.27)$$

3.7.1 Modelo $k - \varepsilon$ de Turbulência

O modelo $K - \varepsilon$ padrão (LAUNDER e SPALDING, , 1974) baseado na hipótese de Boussinesq, que também é conhecido como modelo de Dissipação viscosa (*Eddy Viscosity Models*), apresenta comportamento isotrópico dos tensores de Reynolds.

Este modelo sugere que a turbulência consiste de pequenos turbilhões que são continuamente formados e dissipados, e na qual os tensores de Reynolds são assumidos serem proporcionais à média dos gradientes de velocidade. Isto define o modelo da *Dissipação Viscosa*.

Modelos que utilizam a suposição da viscosidade dissipativa relacionam os tensores de Reynolds e os fluxos turbulentos (fluxos de Reynolds) às variáveis médias do escoamento. Estes modelos usam a hipótese do gradiente difusivo para relacionar os tensores de Reynolds

aos gradientes da velocidade média e a viscosidade turbulenta, conforme mostra a Equação (3.28):

$$\overline{\rho u_i'' u_j''} = \mu_t \left(\frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.28)$$

O fluxo de energia turbulento por sua vez, são modelados usando a suposição da difusividade dissipativa que pode ser expresso através da Equação (3.29):

$$-\overline{\rho u_j'' h''} = \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \overline{h}}{\partial x_j} \quad (3.29)$$

onde Pr_t é o número de Prandtl turbulento e μ_t é a viscosidade turbulenta.

As flutuações dos termos do trabalho viscoso, para turbulência isotrópica homogênea, são aproximadas pela Equação (3.30):

$$\frac{\partial \overline{(u_i'' \tau_{ij})}}{\partial x_j} \approx \overline{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_j} \right)} \quad (3.30)$$

As Equações (3.28), (3.29) e (3.30) somente poderão expressar os termos das flutuações turbulentas das variáveis médias se a energia cinética turbulenta, k , e viscosidade turbulenta, μ_t , forem conhecidas. O modelo de turbulência $k - \varepsilon$ é capaz de fornecer estas variáveis através da solução de duas equações de transporte, sendo uma para k e outra para ε , para posteriormente calcular a viscosidade turbulenta. A primeira derivação para este modelo foi para escoamentos incompressíveis, nos quais as flutuações de massa específica podem ser ignoradas. A mesma formulação é utilizada para escoamentos compressíveis, com a exceção de um termo que possui formulação distinta para este tipo de escoamento. A viscosidade turbulenta, μ_t , é modelada como o produto de uma escala turbulenta de velocidade, V_t , e um comprimento de escala turbulenta, l_t , conforme proposto por Prandtl e Kolmogorov. Introduzindo uma constante de proporcionalidade, chega-se a Equação (3.31):

$$\mu_t = \rho c_\mu l_t V_t \quad (3.31)$$

A escala de velocidade turbulenta é igual a raiz quadrada da energia cinética turbulenta, k , sendo que esta é determinada via Equação de transporte adicional que será apresentada posteriormente:

$$V_t = \sqrt{k} \quad (3.32)$$

No modelo de duas equações $k - \varepsilon$ assume-se que o comprimento de escala é um comprimento de escala de Dissipação e quando as escalas dissipativas turbulentas são isotrópicas, Kolmogorov determinou que:

$$\varepsilon = \frac{k^{\frac{3}{2}}}{l_t} \quad (3.33)$$

na qual ε é a taxa de Dissipação de energia cinética turbulenta de energia cinética. Caso k , ε ou l_t sejam conhecidos, a viscosidade turbulenta é determinada a partir da Equação (3.31) e os tensores de Reynolds podem ser calculados a partir da Equação (3.28), fechando assim as equações turbulentas do transporte de movimento. A tarefa restante é determinar equações para k , ε e condições de contorno apropriadas.

Portanto, a viscosidade turbulenta, μ_t , é calculada à partir do produto de uma escala turbulenta de velocidade e um comprimento de escala turbulenta, como segue:

$$\mu_t = \rho c_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.34)$$

em que ε é a taxa de Dissipação de k (o montante de k por massa e tempo convertidos em energia interna de fluido por ação viscosa) e c_μ é uma constante do modelo.

Finalmente, apresentam-se as Equações de transporte (3.35) e (3.36) deste modelo para a obtenção local dos valores de k e ε :

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{U}_j k)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_k \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + P_k + \rho \varepsilon \quad (3.35)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{U}_j \varepsilon)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_\varepsilon \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + \frac{\varepsilon}{k} (c_{\varepsilon 1} P_k + \rho c_{\varepsilon 2} \varepsilon) \quad (3.36)$$

em que os coeficientes difusivos são dados por:

$$\begin{aligned} \Gamma_k &= \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \\ \Gamma_\varepsilon &= \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \end{aligned} \quad (3.37)$$

A taxa de produção da energia cinética turbulenta P_k é dada por:

$$P_k = -\overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} \quad (3.38)$$

Substituindo o tensor de Reynolds da Equação (3.28), na Equação (3.38) tem-se:

$$P_k = \mu_t \left(\frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U}_j}{\partial x_i} \frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} \right) \quad (3.39)$$

As constantes existentes no equacionamento do modelo $k - \varepsilon$ estão listadas na Tabela 6.

Tabela 6 Constantes do Modelo $k - \varepsilon$ Padrão

C_μ	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	σ_k	σ_ε	Pr_t
0.09	1.44	1.92	1.0	1.3	0.9

3.8 Modelos de Combustão Turbulenta

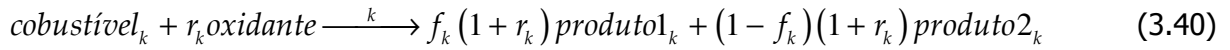
3.8.1 Equacionamento Geral

Durante a reação de combustão, uma mistura de hidrocarbonetos reage com uma corrente de oxidante que geralmente é o ar em proporções encontradas na atmosfera. Os produtos não são usualmente formados em uma única reação química; os componentes do combustível e do oxidante submetem-se a uma série de reações químicas em série. Por exemplo, mais de 40 reações elementares estão envolvidas na combustão do gás metano (CH_4) que é o mais simples dos combustíveis hidrocarbonetos. Na maioria das reações acontecem a formação e subsequente distribuição de espécies químicas intermediárias as quais não existem na zona da chama. Entretanto, estas espécies são importantes para descrever o comportamento preciso e particular da queima quando estudam-se problemas característicos de combustão.

Manipular mais de 40 reações em códigos computacionais de CFD não é atrativo em virtude da tecnologia atual. Muitas características importantes de uma chama podem ser modelados utilizando uma quantidade reduzida de reações incluindo perdas de calor, consumo de oxigênio e qualidade de queima.

O código computacional CFXTM, utilizado neste trabalho, tem a capacidade de resolver escoamentos reagentes, tais como reações de combustão, utilizando o Modelo de Dissipação Eddy (EDM) desenvolvido originalmente por (SPALDING, 1971) e depois testado por (MAGNUSSEN e HJERTAGER, 1976). Da maneira como esta implementado o modelo, um

processo de combustão pode ser descrito genericamente utilizando uma simples reação, conforme a Equação (3.40):



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 (3.41):



Para esta reação considerada, tem-se:

$$f_k = \frac{c \cdot PM_C}{c \cdot PM_C + d \cdot PM_D} \quad (3.42)$$

e

$$r_k = \frac{b \cdot PM_B}{a \cdot PM_A} \quad (3.43)$$

em que PM_i é o peso molecular da espécie i .

3.8.2 Equação das Espécies Químicas

Face aos conceitos empregados acima, uma Equação de transporte extra é resolvida para cada espécie química no modelo. A Equação é uma função de Y_i , da fração mássica da espécie química i , e é apresentada na sua forma final através da Equação (3.44), conforme foi exposto na Seção 3.5:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j Y_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_{i_{ef}} \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \right) + R_i \quad (3.44)$$

Onde:

$$\Gamma_{i_{ef}} = \Gamma_i + \frac{\mu_t}{Sc_t} \quad (3.45)$$

sendo Γ_i a difusividade da espécie química i e Sc_t o número de Schmidt turbulento.

A Equação (3.44) é simplesmente uma Equação geral convectiva-difusiva escrita da mesma forma em que são resolvidas as demais variáveis dependentes do escoamento. Assim, é

conveniente resolver em função de Y_i com a finalidade de estabelecer a composição da mistura.

3.8.3 Modelo de Dissipação Eddy

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

A taxa controlada pelo processo de mistura é inserida neste trabalho, através do modelo de Dissipação Eddy (*Eddy Break-Up Model*) desenvolvido por (SPALDING, 1971), onde a taxa de consumo de combustível é especificada como uma função das propriedades do escoamento local. O modelo de Dissipação *eddy* é baseado na concepção que a reação química é mais rápida do que o processo de transporte no escoamento. Quando os reagentes se misturam à nível molecular, eles instantaneamente formam produto. O modelo supõe que a taxa de reação pode ser relacionada diretamente ao tempo necessário para misturar os reagentes a nível molecular. Em escoamentos turbulentos, como o presente neste trabalho, o tempo de mistura é dominado pelas propriedades dos 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 . 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.

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 (3.46), (3.47) e (3.48), respectivamente:

$$R_{comb,edm} = -C_{Rp} Y_{comb} \frac{\varepsilon}{k} \quad (3.46)$$

$$R_{oxid,edm} = -C_{Rp} \frac{Y_{oxid}}{r_k} \frac{\varepsilon}{k} \quad (3.47)$$

$$R_{prod,edm} = -C'_{Rp} \frac{Y_{prod}}{(1+r_k)} \frac{\epsilon}{k} \quad (3.48)$$

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.

A Equação de transporte (3.44) para a fração mássica de cada componente da mistura é resolvida. 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 3.49:

$$R_{comb,edm} = -\rho \frac{\epsilon}{k} \min \left[C_R Y_{comb}, C_R \frac{Y_{oxid}}{r_k}, C'_R \frac{Y_{prod}}{(1+r_k)} \right] \quad (3.49)$$

3.8.4 Modificação da Equação da Energia

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 (3.50):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H) - \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j H) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_i^n \Gamma_i h_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} + \frac{\mu_t}{P_t r} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + S_E - \sum_i^n h_i^f R_i \quad (3.50)$$

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.

3.8.5 Intensidade de Radiação Térmica

O modelo de radiação empregada neste trabalho científico foi o da Aproximação Diferencial ou também conhecido como P1 ou modelo de Gibbs. O principal objetivo do modelo é

resolver a Equação de transporte de intensidade de radiação térmica, obtendo desta maneira o termo fonte, S_E , da Equação da Energia (3.50). O modelo é uma simplificação da Equação de transporte de radiação e assume que a intensidade de radiação é isotrópica, ou seja, independe da direção em uma dada localização do espaço, sendo um modelo adequado para problemas que envolvem meios com espessura óptica maior que 1. Nestes casos opticamente densos a radiação térmica interage com o interior do domínio, bem como suas superfícies. Quando um meio é opticamente denso, a radiação térmica é absorvida e então refletida em todas as direções. Esta situação é conhecida como “limite difusivo” na qual a intensidade de radiação é independente da direção.

Toda a modelagem é bastante dispendiosa, e portanto não será apresentada neste trabalho. Mais informações podem ser encontradas em (GUIA CFX, 2006) ou em (RAITHBY, 1991) que é a referência utilizado pelo código computacional.

No próximo capítulo é mostrado um método de discretização utilizado para transformar as equações diferenciais de conservação de massa, energia e quantidade de momento em um conjunto de equações algébricas, sendo estas equações algébricas factíveis de serem resolvidas por um computador.

4 Métodos Numéricos

Equation Section (Next)

Soluções analíticas, para as Equações de Navier Stokes, existem somente para escoamentos simples sob condições ideais. Para escoamentos reais, um tratamento numérico deve ser adotado, para que as equações diferenciais sejam resolvidas com a utilização de um método de aproximação.

As complexas formulações de Navier-Stokes aplicadas para a hipótese de um meio contínuo, apresentas inicialmente por Navier em 1822 (BIRD, ,1960), constituíram-se no ponto de partida do desenvolvimento e aperfeiçoamento de diversas técnicas de solução aplicadas à engenharia. Paralelamente às analíticas, as técnicas numéricas obtiveram um impulso extraordinário com o aumento do desempenho do processamento computacional, tanto em nível de hardware como de software. Os métodos numéricos das diferenças finitas e, mais recentemente o dos volumes finitos, o qual está sendo empregado neste trabalho, adaptaram-se facilmente aos princípios lógicos do tratamento dos dados computacionalmente. Ambos os métodos compreendem alguns procedimentos básicos comuns e que serão discutidos especificamente para o método dos volumes finitos.

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

O objetivo principal deste Capítulo é apresentar, de uma maneira sucinta, as particularidades dos métodos numéricos utilizados, neste trabalho, pelo pacote CFXTM. Com isto, o enfoque será centrado na discretização das equações e nos esquemas de interpolação utilizados durante a realização do presente trabalho.

4.1 Equações de Transporte

As aproximações das equações diferenciais por uma expressão algébrica envolvem uma discretização das equações no domínio espacial dentro de um volume de controle. As

equações governantes são integradas sobre cada volume de controle, tal que a quantidade relevante (massa, movimento, energia, etc.) é conservada para cada volume de controle. Considere as equações de conservação da massa Eq.(4.1), movimento Eq.(4.2) e escalar, Eq.(4.3) (a Equação da energia apresenta-se na forma de um escalar), expressa em coordenadas cartesianas (as equações da continuidade, movimento e escalares foram discutidas no Capítulo 3):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j) = 0 \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho U_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \mu U_j) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{ef} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \right) + S_{U_i} \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \mu \phi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\Gamma_{ef} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) + S_{\phi} \quad (4.3)$$

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.

4.2 Método dos Volumes Finitos com Base em Elementos Finitos

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 Gauss¹ e integrando as equações supracitadas, obtêm-se as Equações (4.4), (4.5) e (4.6) para conservação da massa, movimento e escalar, respectivamente.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_v \rho dv + \int_s \rho U_j dn_j = 0 \quad (4.4)$$

¹ Método utilizado para converter integrais de volume em integrais de superfície

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_v \rho U_i dv + \int_s \rho U_j U_i dn_j = - \int_s P dn_j + \int_s \mu_{eff} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) dn_j + \int_v S_{U_i} dv \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_v \rho \phi dv + \int_s \rho U_j \phi dn_j = \int_s \Gamma_{eff} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) dn_j + \int_v S_\phi dv \quad (4.6)$$

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.

O que define um volume de controle é um aspecto importante para a implementação do 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).

4.2.1 Discretização das Equações de Transporte

Apresentada a idéia de elemento de fluxo pode-se então retornar a questão de discretização numérica das Equações de continuidade Eq.(4.4), movimento Eq.(4.5) e escalar Eq.(4.6).

A introdução do conceito de elemento de fluxo, para discretização do domínio computacional, gera um volume de controle para cada nó tendo sua fronteira definida por oito segmentos em linha, para duas dimensões, e 24 superfícies quadriláteras para três dimensões. Este arranjo em duas dimensões é apresentado na Figura 12.

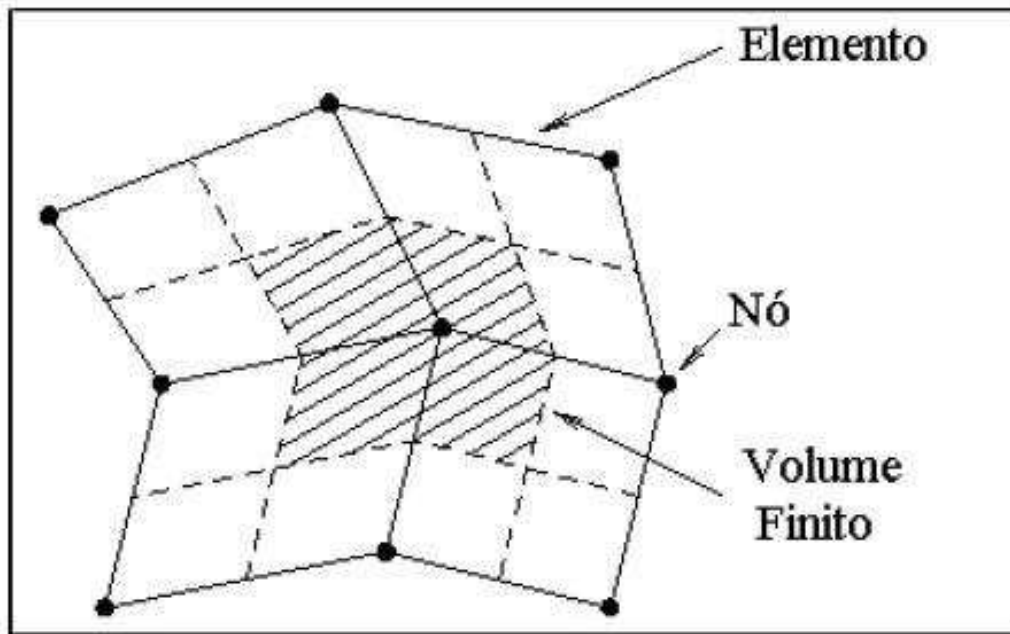


Figura 12: Definição de um volume de controle bidimensional

As equações integradas, Equações (4.4), (4.5) e (4.6) 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 Figura 13 para um elemento bidimensional quadrilátero.

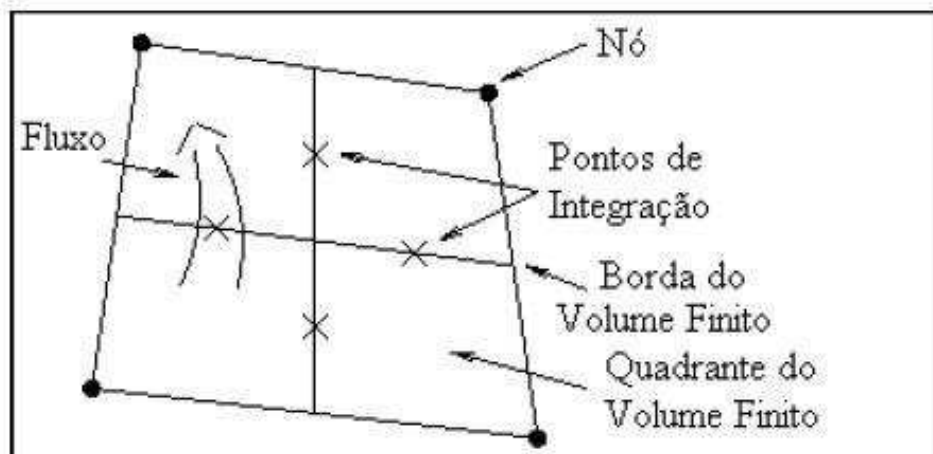


Figura 13 Definição dos pontos de integração para um elemento 2-D quadrilátero

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

$$\rho V \left(\frac{\rho - \rho^o}{\Delta t} \right) + \sum_{pi.} \left(\rho U_j \Delta n_j \right)_{pi} = 0 \quad (4.7)$$

$$\begin{aligned} \rho V \left(\frac{U - U_i^o}{\Delta t} \right) + \sum_{pi.} \dot{m}_{pi} (U_j)_{pi} &= \sum_{pi.} (P \Delta n_i)_{pi} \\ + \sum_{pi.} \left(\mu_{ef} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \Delta n_j \right)_{pi} &+ \bar{S}_{U_i} V \end{aligned} \quad (4.8)$$

$$\rho V \left(\frac{\phi - \phi_i^o}{\Delta t} \right) + \sum_{pi.} \dot{m}_{pi} \phi_{pi} = \sum_{pi.} \left(\Gamma_{eff} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \Delta n_j \right)_{pi} + \bar{S}_{phi} V \quad (4.9)$$

onde V é o volume de controle, o subscrito $pi.$ 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 \dot{m}_{pi} através da superfície presente nas equações é dado por:

$$\dot{m}_{pi} = \left(\rho U_j \Delta n_j \right)_{pi}^o \quad (4.10)$$

4.3 Termo Transiente

Para os termos transientes são utilizados o esquema de primeira ordem *backward Euler*, Equação (4.11), ou o esquema de segunda ordem *backward Euler*, Equação (4.12).

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_v \rho \phi dv \right) = \rho V \left(\frac{\phi - \phi^o}{\Delta t} \right) \quad (4.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_v \rho \phi dv \right) = \frac{\rho V}{\Delta t} \left(\frac{2}{3} \phi - 2\phi^o + \frac{1}{2} \phi^{oo} \right) \quad (4.12)$$

onde os superescritos “o” representa o passo de tempo anterior (antigo passo de tempo) e o “oo” representa um passo de tempo anterior ao antigo passo de tempo. Estes esquemas são robustos, totalmente implícitos, conservativos no tempo e não produzem limitações no passo de tempo.

4.4 Termos Convectivos

Para completa discretização dos termos convectivos, a variável $\phi_{p.i.}$ deve ser relacionada aos valores nodais de ϕ . A implementação dos termos convectivos no CFX10 pode ser descrita da seguinte forma:

$$\phi_{p.i.} = \phi_{seg} + \beta \nabla \phi \cdot \Delta \vec{r} \quad (4.13)$$

onde ϕ_{seg} representa o nó seguinte, $\Delta \phi$ é o gradiente de ϕ e \vec{r} é o vetor do nó seguinte ao $p.i.$ (ponto de integração). Uma vez que apenas um método de interpolação foi utilizado para tratar os termos convectivos, somente este será relatado neste trabalho. O esquema utilizado em todas as Simulações foi o High Resolution onde o valor de β é computado próximo a 1. A experiência para o valor de β esta baseado nos trabalhos de (BARTH e JESPERSON, 1989). O esquema é de grande acurácia e robusto (reduz-se para um esquema de primeira ordem se: $\beta = 0$, próximo as descontinuidade e nos escoamentos livres onde há poucas variações).

4.5 Termos Difusivos

Seguindo a aproximação padrão pelos elementos finitos, as funções forma (*shape functions*) são utilizadas para avaliar as derivadas para todos os termos difusivos. Por exemplo, para a derivada na direção x no $p.i.$,

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{p.i.} = \sum_n \frac{\partial N_n}{\partial x} \Big|_{p.i.} \phi_n \quad (4.14)$$

A somatória é sobre todas as *shape functions* do elemento. As derivadas cartesianas das *shape functions* podem ser expressas pelas suas derivadas locais via Jacobiano (GUIA CFX, , 2006):

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial N}{\partial x} \\ \frac{\partial N}{\partial y} \\ \frac{\partial N}{\partial z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial s} & \frac{\partial y}{\partial s} & \frac{\partial z}{\partial s} \\ \frac{\partial x}{\partial t} & \frac{\partial y}{\partial t} & \frac{\partial z}{\partial t} \\ \frac{\partial x}{\partial u} & \frac{\partial y}{\partial u} & \frac{\partial z}{\partial u} \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} \frac{\partial N}{\partial s} \\ \frac{\partial N}{\partial t} \\ \frac{\partial N}{\partial u} \end{bmatrix} \quad (4.15)$$

Os gradientes da função forma podem ser avaliados na atual localização de cada $p.i.$ (*true tri-linear interpolation*), ou na localização de intersecção de cada $p.i.$ da superfície com a aresta do elemento (*linear-linear interpolation*).

4.6 Gradiente de Pressão

A integral de superfície do gradiente de pressão, presente na Equação de movimento (*momentum*), envolve a avaliação da expressão:

$$\left(P \Delta n \right)_{p.i.} \quad (4.16)$$

A obtenção de $P_{p.i.}$ é utilizando *shape functions*:

$$P_{pi} = \sum_n N_n \left(s_{p.i.}, t_{p.i.}, u_{p.i.} \right) P_n \quad (4.17)$$

Assim como no termo difusivo, a função forma utilizada para interpolar a pressão P pode ser avaliada na atual localização de cada $p.i.$ (*true tri-linear interpolation*), ou na localização de intersecção de cada $p.i.$ da superfície com a aresta do elemento (*linear-linear interpolation*).

4.7 Acoplamento Pressão Temperatura

O CFXTM utiliza-se de uma única célula. Este arranjo é conhecido como co-localizado e é um mecanismo para superar o desacoplamento entre pressão e velocidade presente nos arranjos onde as células estão deslocadas. Uma representação unidimensional da conservação da massa pode ser escrita como:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)_i = \frac{\Delta x^3 A}{4 \dot{m}} \left(\frac{\partial^4 P}{\partial x^4} \right)_i = 0 \quad (4.18)$$

onde $\dot{m} = \rho U_j \Delta n_j$

A Equação da continuidade é uma aproximação por diferenças centrais de segunda ordem aproximada por uma derivada de primeira ordem na velocidade, modificada por uma derivada de quarta ordem na pressão que age como um redistribuidor da influência da pressão. Este

método é bastante robusto no referente a mudanças bruscas na pressão ou ação de forças de campo.

Após a descrição de todas as equações constitutivas do modelo e o modelo de discretização utilizado, no capítulo a seguir são mostrados os resultados do estudo fluidodinâmico no forno de cozimento de anodos, mostrando a influência do ciclo de cozimento e geometria da câmara na distribuição de temperatura do anodo de carbono.

5 Resultados

Para todos os casos foram simulados sete etapas, três pré-aquecimento e quatro cozimentos. As quatro etapas de resfriamento não foram simuladas porque não fornecerem informações relevantes ao estudo, implicando em aumento significativo de tempo computacional para resolução do problema.

5.1 Geometria e malha da câmara

As figuras abaixo apresentam a geometria da câmara. É importante salientar que o anodo mostrado na geometria representa um conjunto de 10 anodos usados na planta de processo.

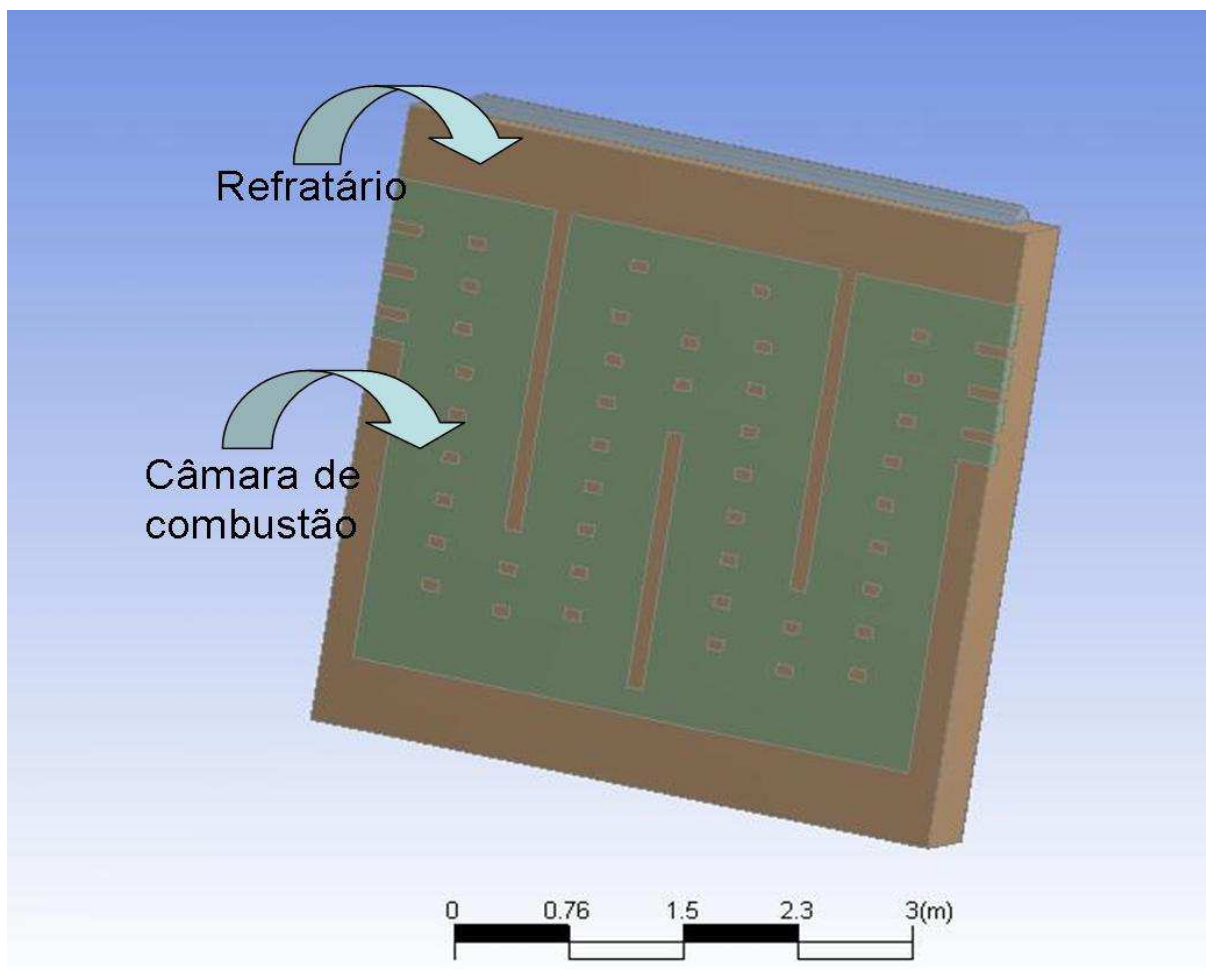


Figura 14 Vista frontal da geometria da câmara

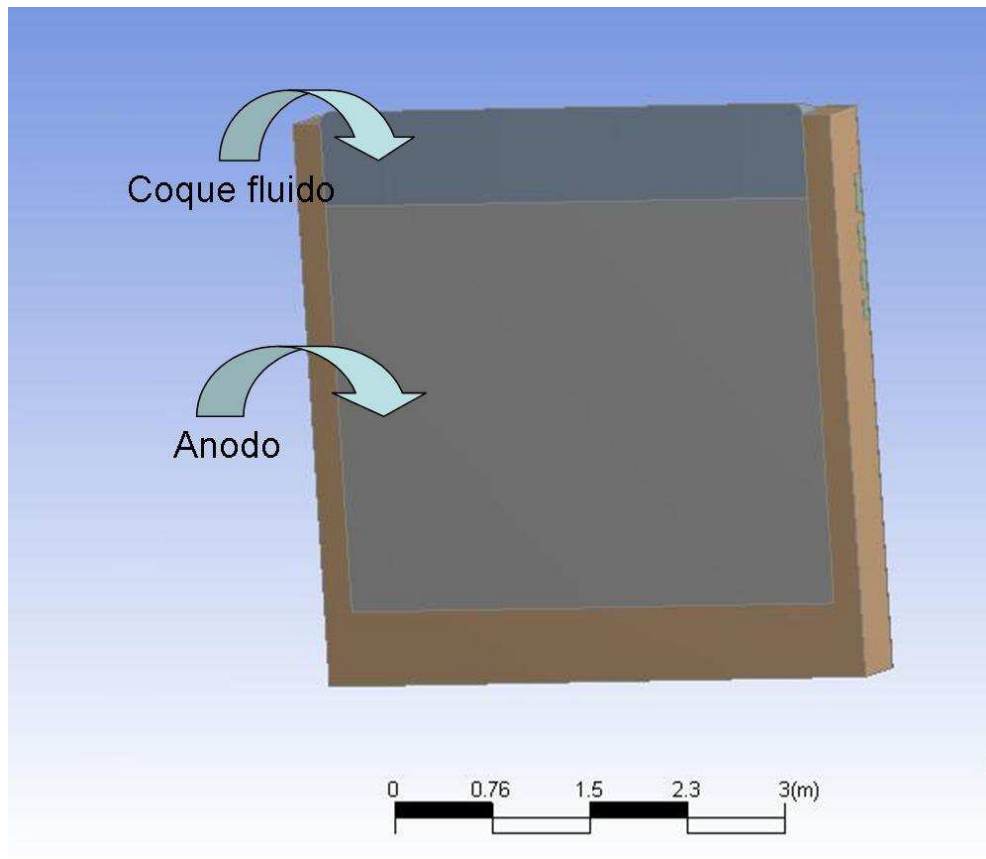


Figura 15 Vista oposta da geometria da câmara

Na Figura 16 vê-se a malha utilizada nas simulações, ela tem aproximadamente 100.000 elementos.

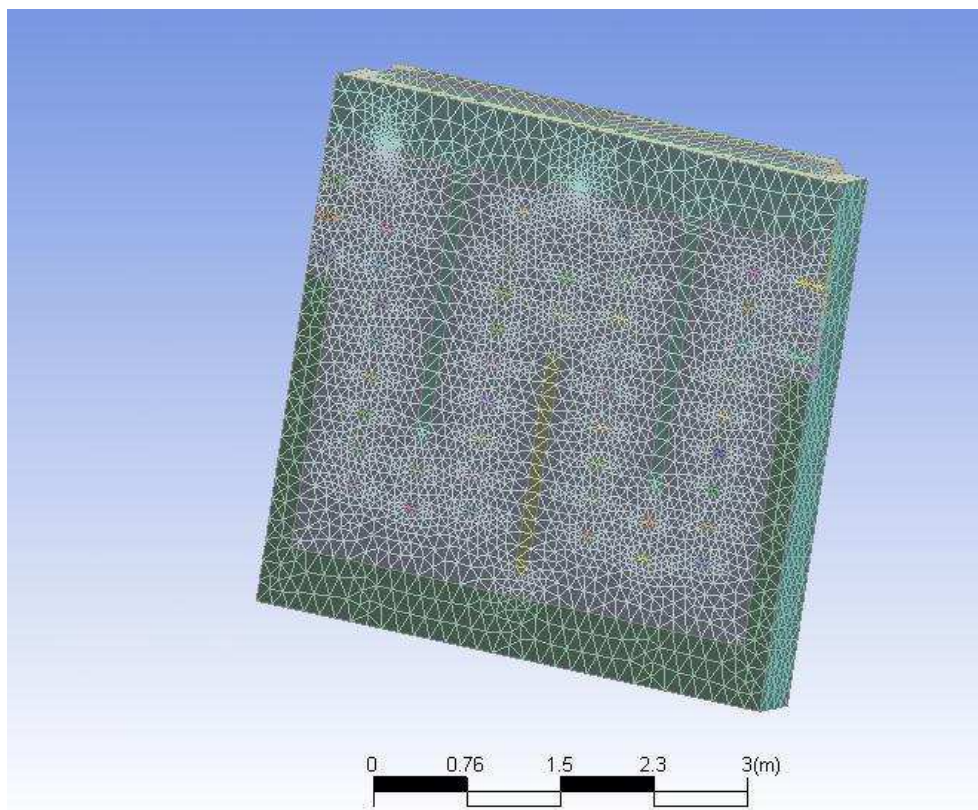


Figura 16 Vista frontal da malha utilizada da câmara

5.2 Validação do modelo

As premissas utilizadas na modelagem do processo de cozimento de anodos de carbono foram:

a) A reação de combustão do diesel foi simulada usando o Eddy dissipation model, este conceito do controle de reação é aplicável em muitos problemas industriais de combustão onde as taxas da reação são rápidas comparadas às taxas de mistura do reagente. Neste modelo a taxa da reação é proporcional ao tempo de mistura definida pela energia cinética turbulenta k , e à taxa de dissipação. A expressão para a taxa da reação é:

$$Rate \propto \frac{\varepsilon}{k} \quad (4.19)$$

b) Para o estudo câmara de combustão, a transferência calor por radiação térmica é um fenômeno muito importante e que não pode ser desconsiderado, ele é importante principalmente nos estágios de aquecimento. O seu efeito foi incluído na modelagem usando o modelo P1 disponível no solver do CFX. Este modelo é uma simplificação da equação de transporte da radiação, que suponha a intensidade de radiação é isotrópica, ou seja, o sentido independente de uma dada posição no espaço, (RAITHBY, , 1991).

c) No controle da vazão de diesel é feito através de uma subrotina em FORTRAN,(ver anexo A). Esta subrotina tem um controlador on-off que liga e desliga os queimadores de forma que obedeça a curva de cozimento, Figura 17, assim garantimos um aquecimento gradual para ao processo, e também temperaturas em valores aceitáveis que não venham a fundir o refratário.

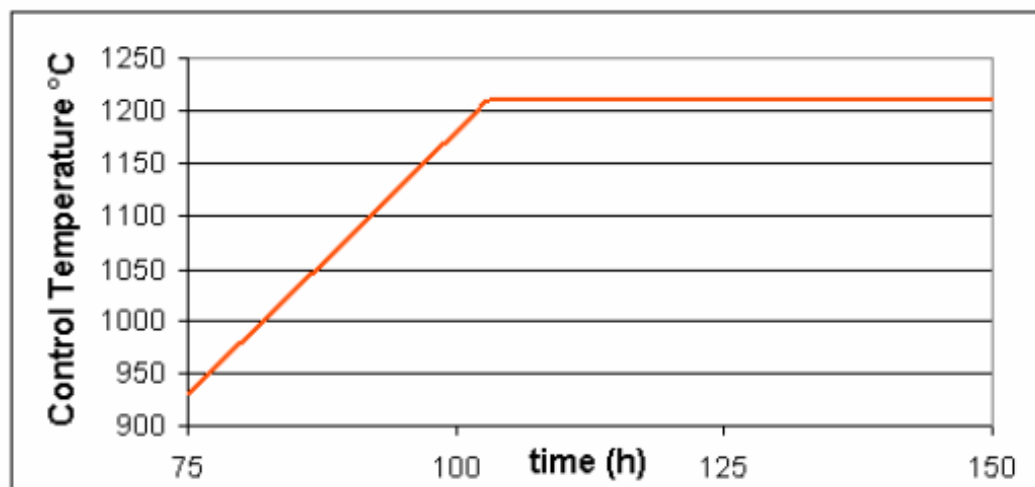


Figura 17 Curva de cozimento de anodos

d) Nos estudos realizados a energia liberado pela queima dos voláteis, foi obtida a partir de uma curva, Figura 18, onde o calor liberado é função da temperatura no anodo. Assim uma

quantidade fixa de calor foi adicionada à câmara dependendo da temperatura no anodo em um ponto predefinido na simulação. O calor adicionado é a soma dos calores liberados pelos três principais componentes dos voláteis, CH₄, H₂ e aromáticos.

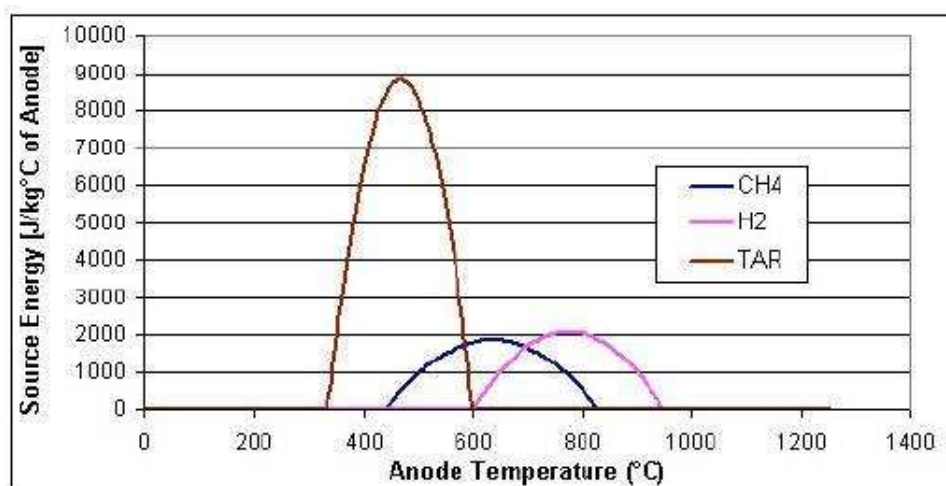


Figura 18 Curva de cozimento de anodos

e) As perdas de calor do anodo e da câmara para o ambiente são muito importantes na formação dos perfis de temperatura no anodo de carbono, portanto uma estimativa realística é de extrema relevância no resultado deste trabalho. Para as perdas ocorridas pelas laterais (anodo e câmara de combustão) foram consideradas adiabáticas, já que as câmaras adjacentes estão muito próximas e elas apresentam temperaturas semelhantes. As perdas pela base (anodo e câmara de combustão) foram aproximadas através de um meio semi-infinito, onde o calor que chega no refratário mais interno é transmitido para o solo, este modelo só é factível para simulações transientes. E as perdas de energia pelo topo foram calculadas levando-se em consideração a temperatura da superfície do refratário, a temperatura do ambiente e o coeficiente de transferência de calor por convecção térmica. Esta é uma condição de contorno de terceira espécie, onde o calor que chega por condução a superfície do refratário é transmitido por convecção para o ar ambiente.

Portanto o modelo validado e todos os demais casos estudados neste trabalho apresentam:

- Regime Transiente
- reação química – modelo Eddy de dissipação térmica.
- Radiação térmica – modelo P1
- controle de vazão de diesel através de um controlador on-off (subrotina FORTRAN);
- queima de voláteis
- Perda de calor pelas extremidades da câmara.

Nas figuras abaixo se vê a comparação do modelo validado da câmara de cozimento com o resultado real de processo. Esta primeira figura mostra o campo de temperatura simulado imediatamente após o 7º estágio (ou 4º cozimento).

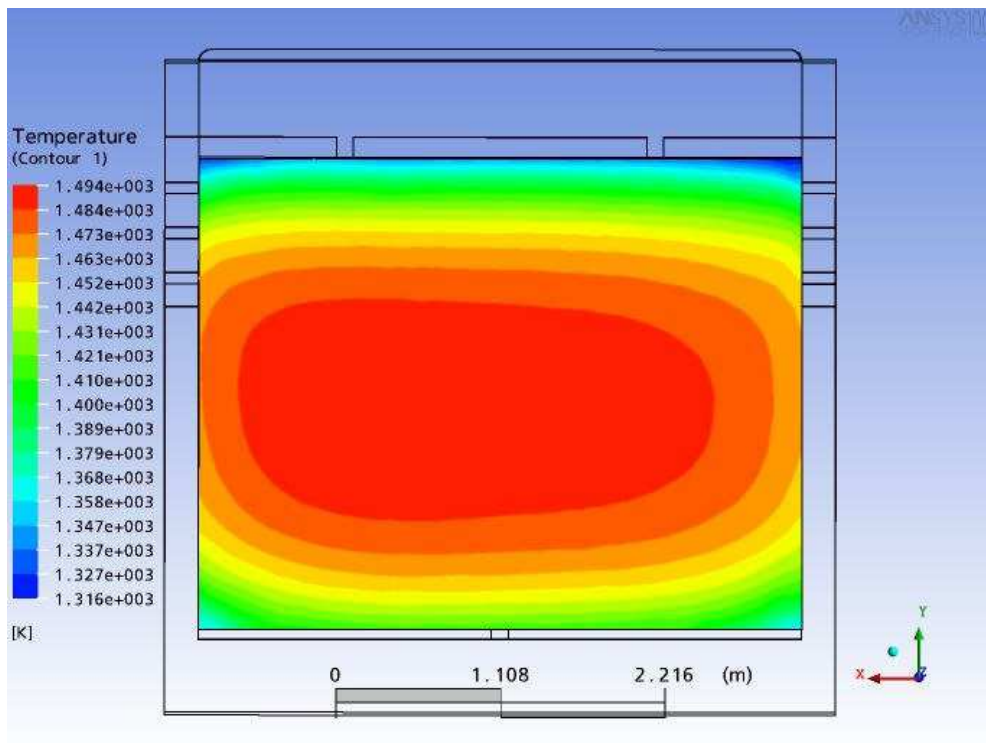


Figura 19 campo de temperatura simulado.

A figura mostra o campo de temperatura real imediatamente após o 7º estágio (ou 4º cozimento).

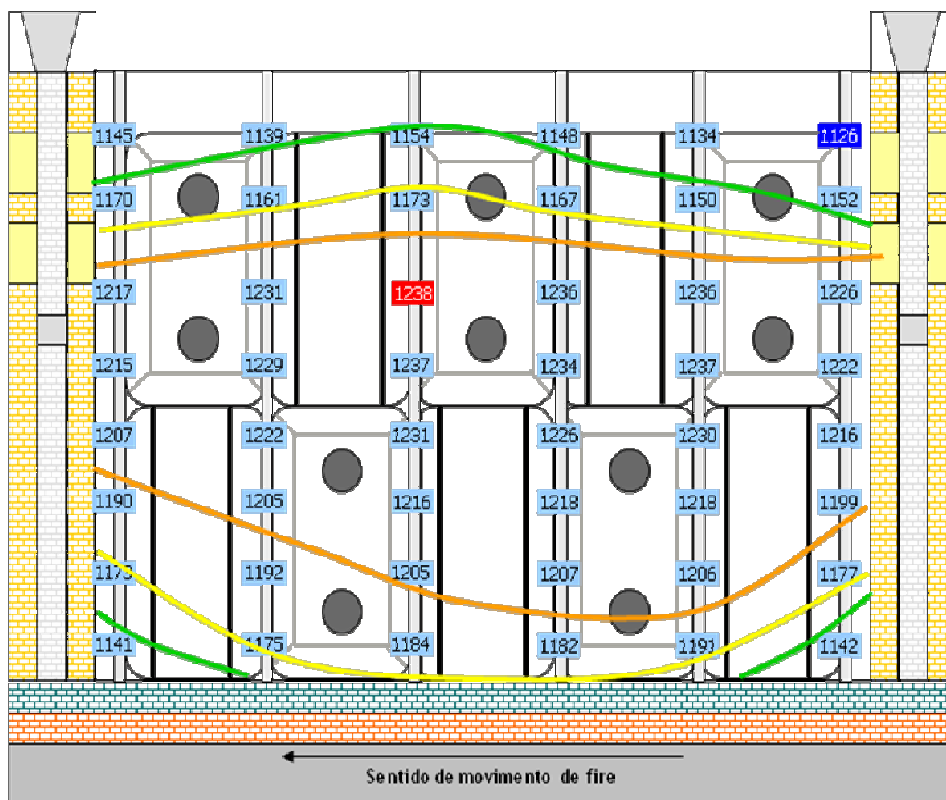


Figura 20 campo de temperatura real.

A figura abaixo mostra a curva de cozimento simulada, as linhas indicam a temperatura máxima, mínima e média no anodo. Na simulação não foi considerado as etapas de resfriamento do processo.

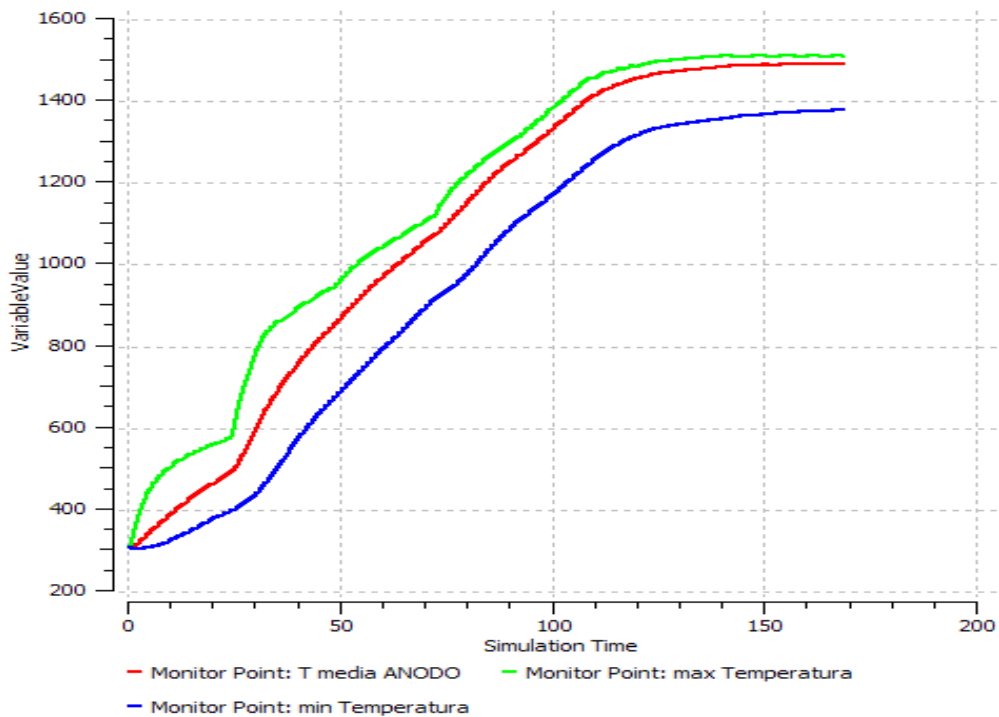


Figura 21 Curva de cozimento simulada sem a etapa de resfriamento

A figura abaixo mostra a curva de aquecimento real do processo de cozimento de anodos, comparando-a com a anterior pode-se perceber uma boa concordância entre as curvas, isto é mais uma evidência que o modelo desenvolvido neste trabalho está validado.

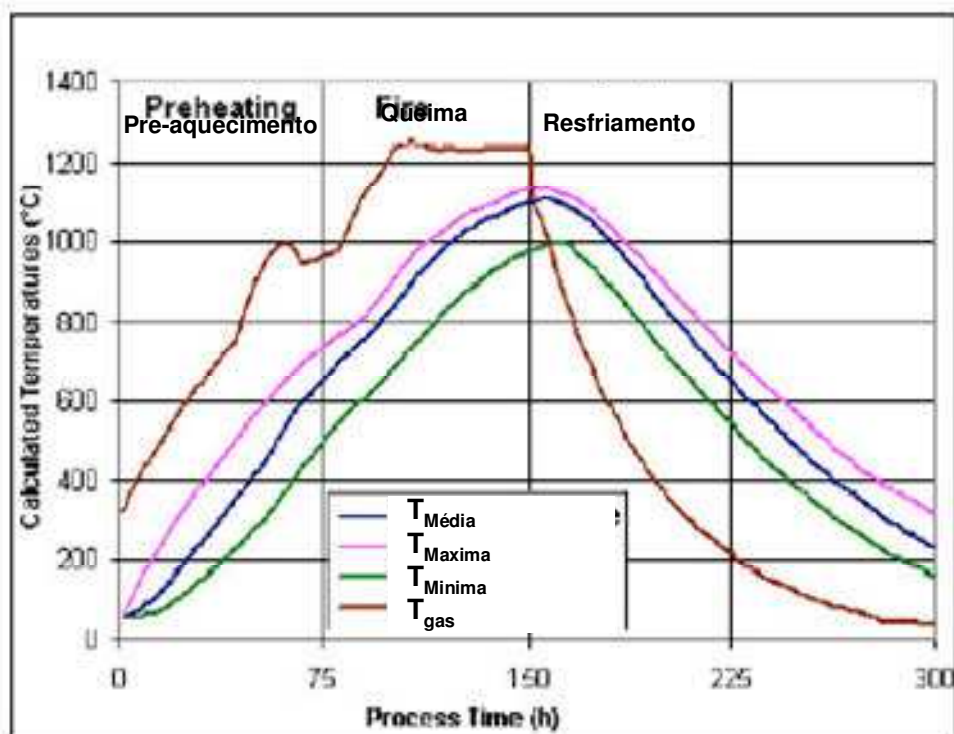


Figura 22 Curva de cozimento real completa

5.3 Influência da geometria na dinâmica do processo.

5.3.1 Efeito do fluxo de ar e combustível

A Figura 23 mostra a câmara cozimento atualmente em operação pela Alumar. Esta figura mostra o campo de velocidade no interior da câmara. Nota-se claramente a formação de caminhos preferências de fluxo.

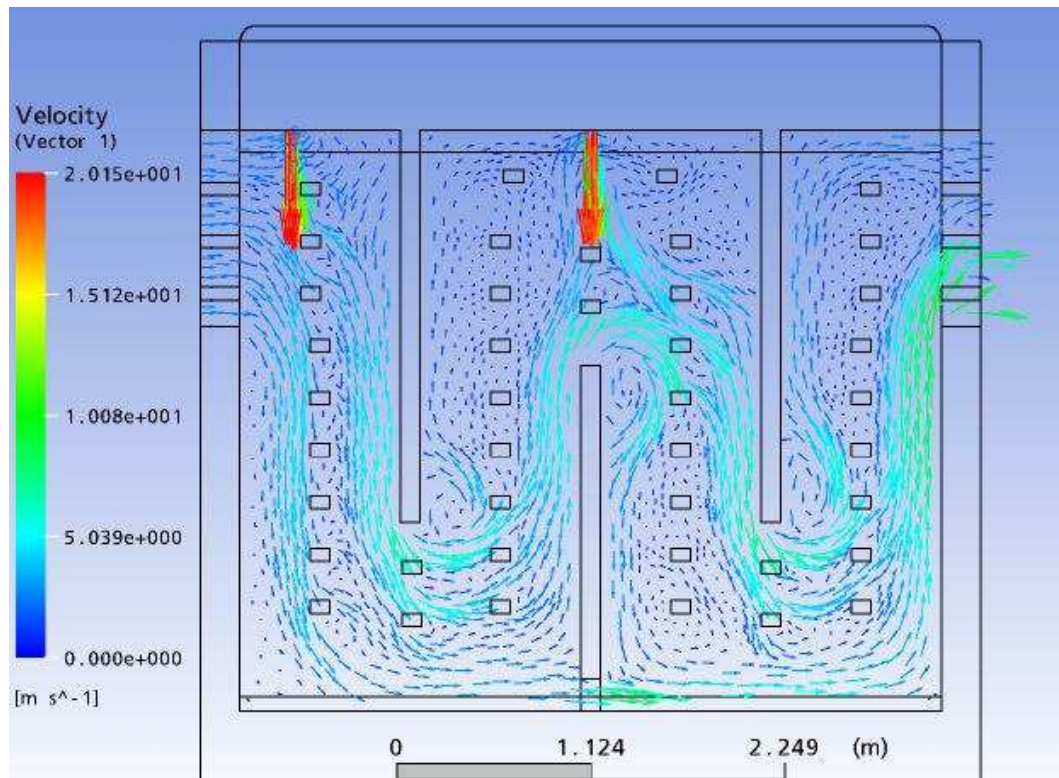


Figura 23 Campo de velocidade na câmara para a condição com tijolo interno.

A Figura 24 mostra o campo de velocidade no interior da câmara. com uma pequena abertura nas chicanas superiores. Novamente pode-se ver a formação de caminhos preferências de fluxo.

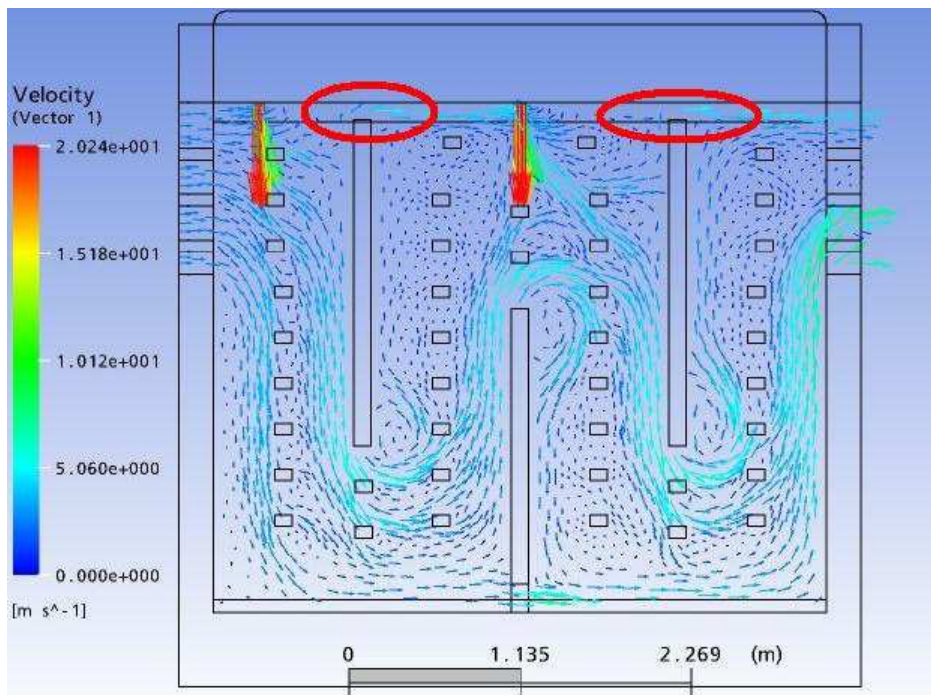


Figura 24 campo de velocidade na câmara com abertura nas chicanas.

A Figura 25 mostra o campo de velocidade no interior da câmara com tijolos internos alternados. Aqui também pode-se ver a formação de caminhos preferências de fluxo.

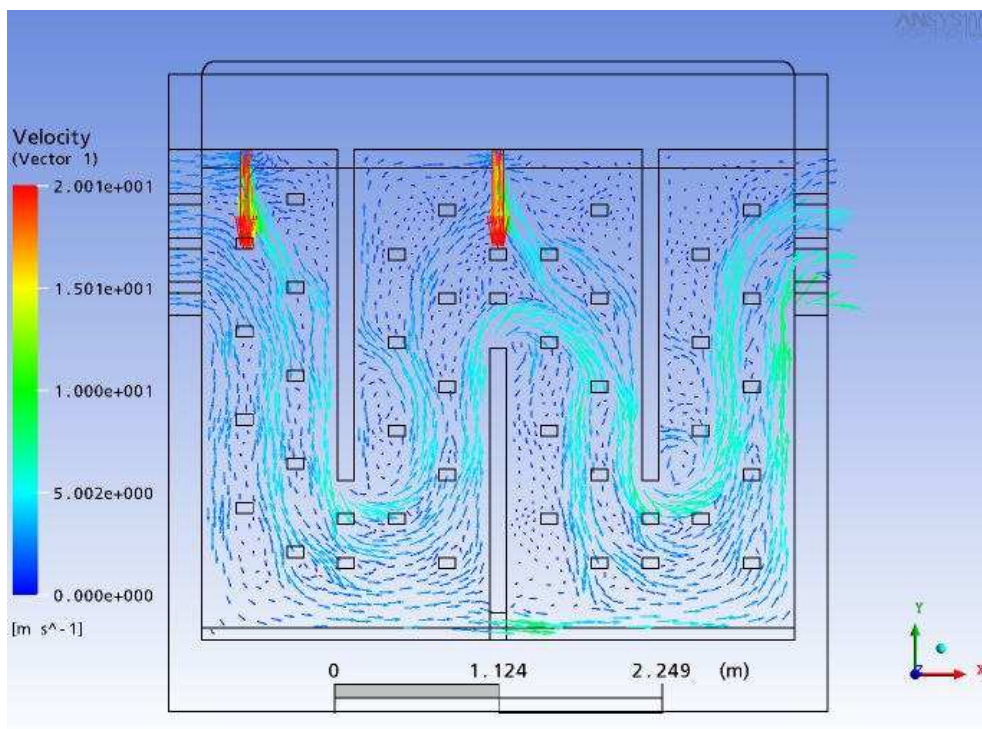


Figura 25 campo de velocidade na câmara com tijolos em posições alternadas.

5.3.2 Efeito da distribuição de temperatura no anodo

A Figura 26 mostra a distribuição de temperatura no anodo atual da Alumar. Esta figura representa um modelo validado do processo de cozimento.

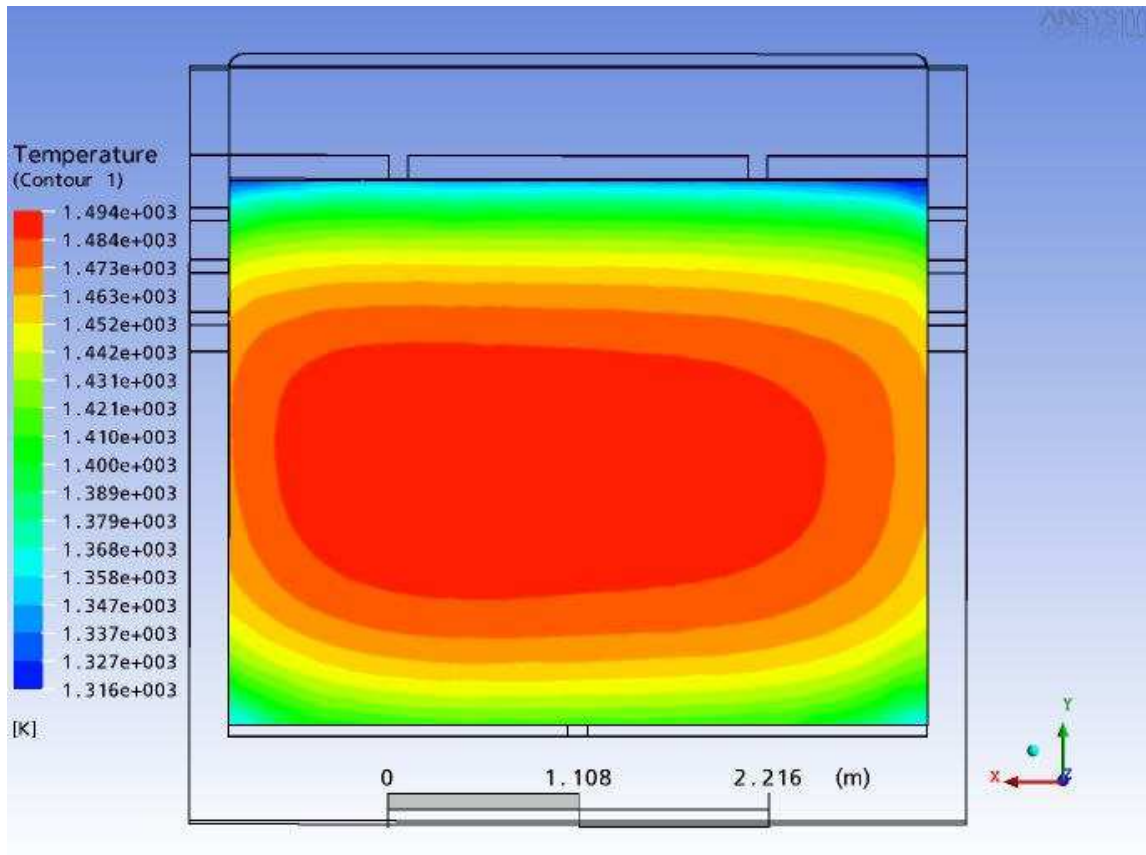


Figura 26 Distribuição de temperatura no anodo.

Na Figura 27 vê-se a distribuição de temperatura no anodo para o caso em que a câmara tem com uma pequena abertura nas chicanas superiores, o objetivo destas aberturas é criar um fluxo de ar quente na parte superior da câmara e diminuir o delta de temperatura, mas a alteração não surtiu o efeito desejado, pois o delta de temperatura no anodo permaneceu praticamente inalterado.

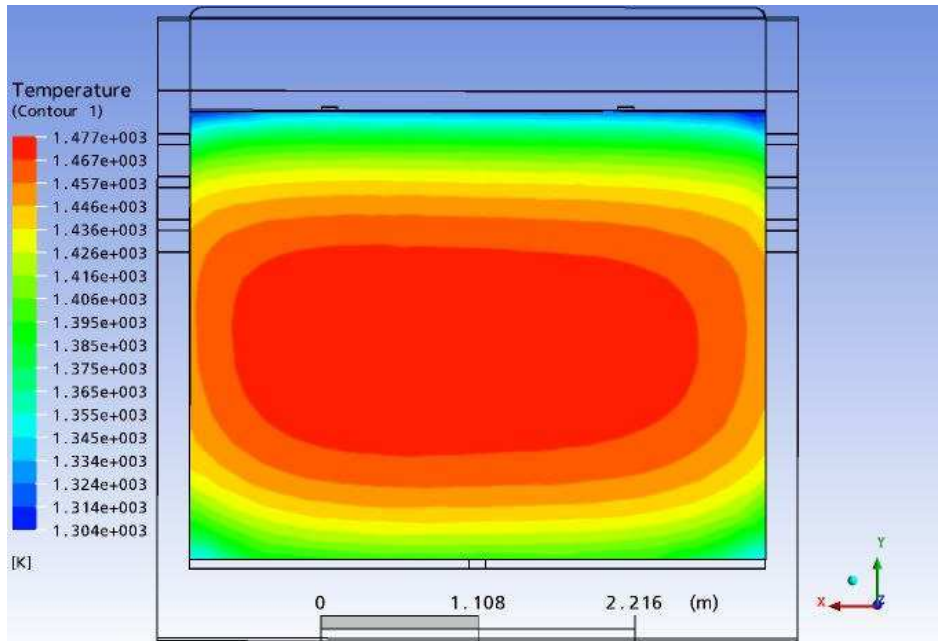


Figura 27 Distribuição de temperatura no anodo.

A Figura 28 mostra a distribuição de temperatura no anodo para uma câmara com tijolos internos alternados. Aqui o objetivo é aumentar a turbulência e distribuir melhor o calor no interior da câmara, diminuindo assim o delta de temperatura. Mas novamente não houve diminuição do delta e o perfil ficou praticamente inalterado.

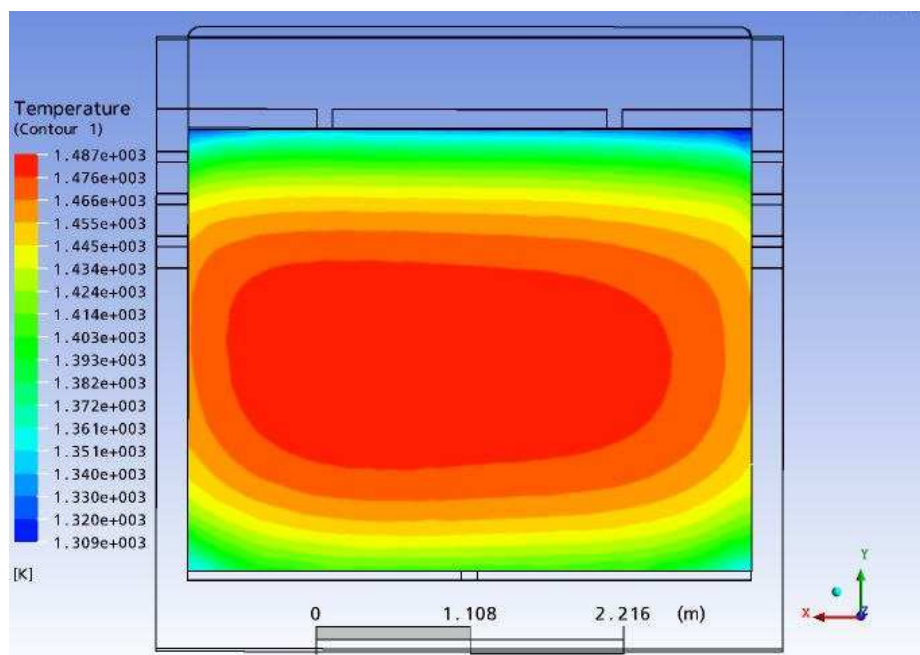


Figura 28 Distribuição de temperatura no anodo.

A Figura 29 mostra a distribuição de temperatura no anodo para um caso com uma cobertura extra de coque fluido sobre os anodos. Para este caso, não foi mostrado o perfil de velocidade, já que ele é exatamente igual a câmara original. Neste cenário o objetivo é diminuir a perda calor para o ambiente através de uma cobertura extra de coque fluido sobre os anodos, diminuindo-se assim o delta de temperatura na câmara. Mas novamente não houve diminuição do delta e o perfil ficou praticamente inalterado.

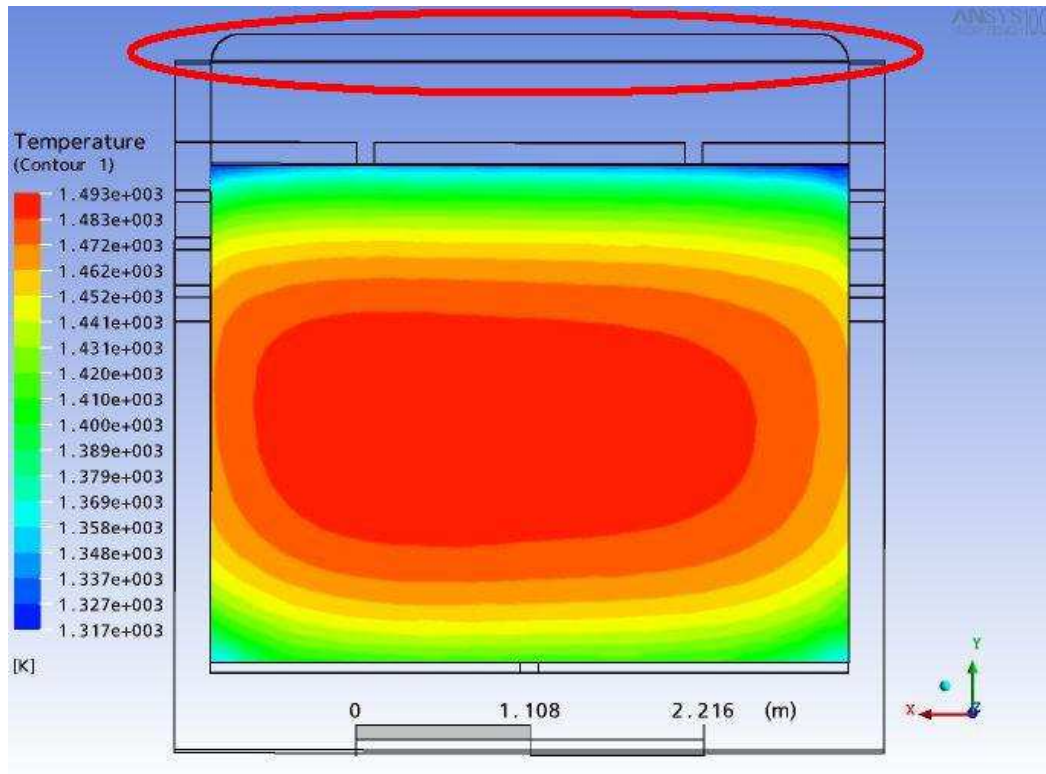


Figura 29 Distribuição de temperatura no anodo.

Ao contrário das expectativas, os resultados acima mostram que a posição dos tijolos internos da câmara foram quase que irrelevantes para a obtenção de um perfil de temperatura mais homogêneo nos anodos de carbono. Também ficou bem claro que para todos os casos estudados, houve sempre a formação de zonas preferências de fluxo, e isto provavelmente tem papel preponderante na formação dos perfis de temperatura no anodo. Vimos também que um aumento na cobertura de coque fluido sobre o anodo não altera o perfil de temperatura no mesmo.

5.4 Influência do ciclo de cozimento

Da Figura 30 a Figura 43 são apresentados os perfis de temperatura no anodo para cada estágio do pré-aquecimento (03 estágios) e do aquecimento (04 estágios). As simulações foram realizadas considerando dois intervalos de tempo em cada estágio: 20 e 24 h. De modo a proporcionar melhor análise, a escala de temperatura foi mantida igual para os dois ciclos.

A Figura 30 e a Figura 31 mostram os resultados para o 1º estágio, Como se trata do pré-aquecimento, somente ar oriundo do 2º estágio alimenta a câmara de combustão (processo em contra-corrente). A temperatura do ar foi fixada em 400 °C, enquanto a temperatura inicial do anodo (perfil uniforme) foi fixada em 30 °C.

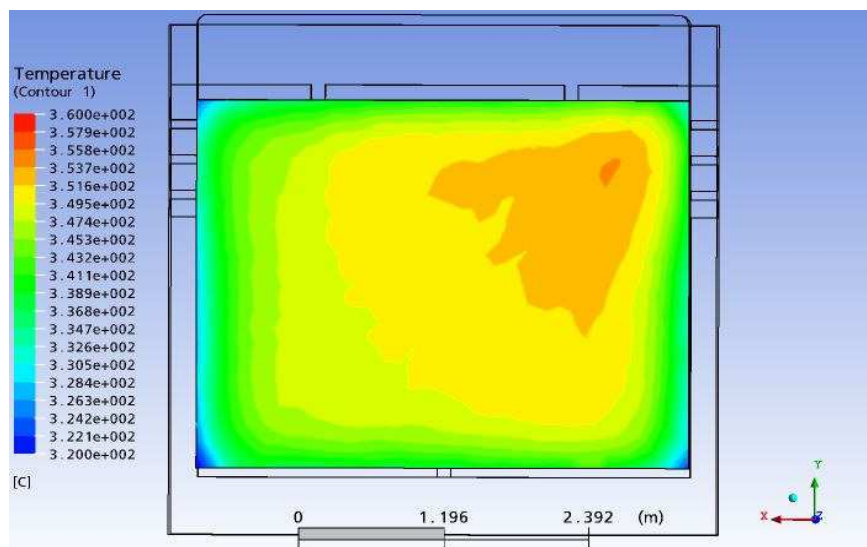


Figura 30 Perfil de temperatura no anodo para o 1º estágio com ciclo de 20

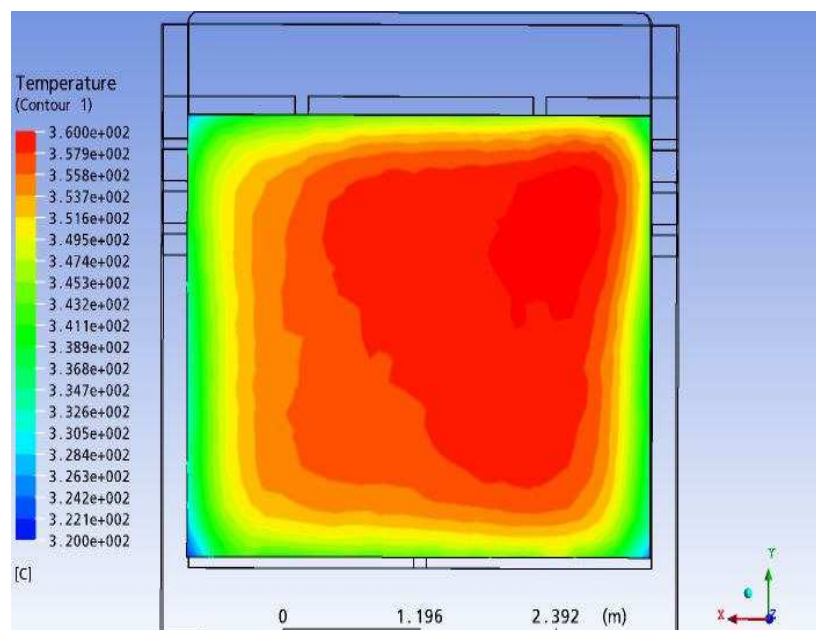


Figura 31 Perfil de temperatura no anodo para o 1º estágio com ciclo de 24h

O 2º estágio, (Figura 32 e Figura 33), também corresponde a um ciclo de pre-aquecimento, então somente ar oriundo do 3º estágio alimenta a câmara de combustão. A temperatura do ar foi fixada em 800 °C (dado de processo), enquanto o perfil inicial de temperatura do anodo foi o resultado do 1º estágio.

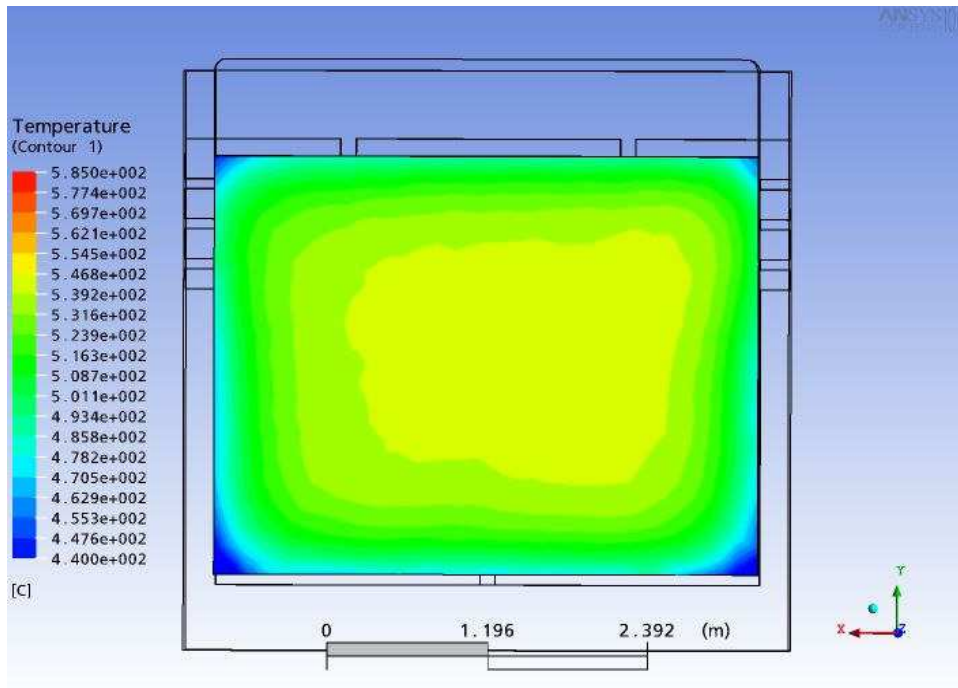


Figura 32 Perfil de temperatura no anodo para o 2º estágio com ciclo de 20h.

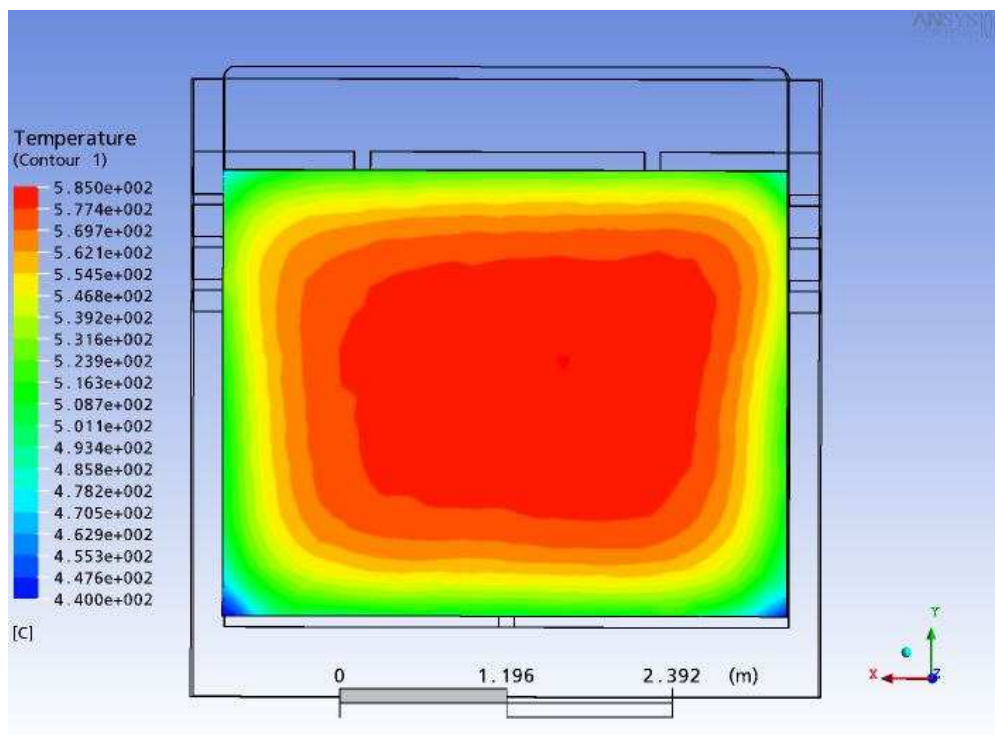


Figura 33 Perfil de temperatura no anodo para o 2º estágio com ciclo de 24h

Para o 3º estágio, Figura 34 e Figura 35, somente ar oriundo do 4º estágio alimenta a câmara de combustão. A temperatura do ar foi fixada em 1100 °C, enquanto o perfil inicial de temperatura do anodo foi o resultado do 2º estágio.

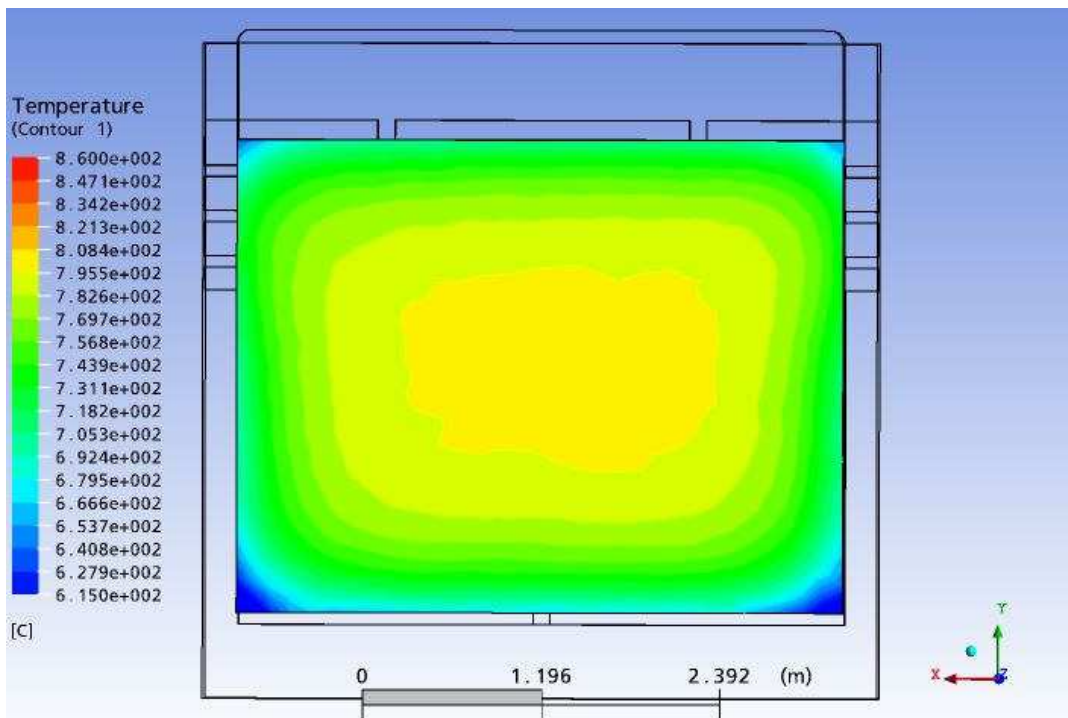


Figura 34 Perfil de temperatura no anodo para o 3º estágio com ciclo de 20h

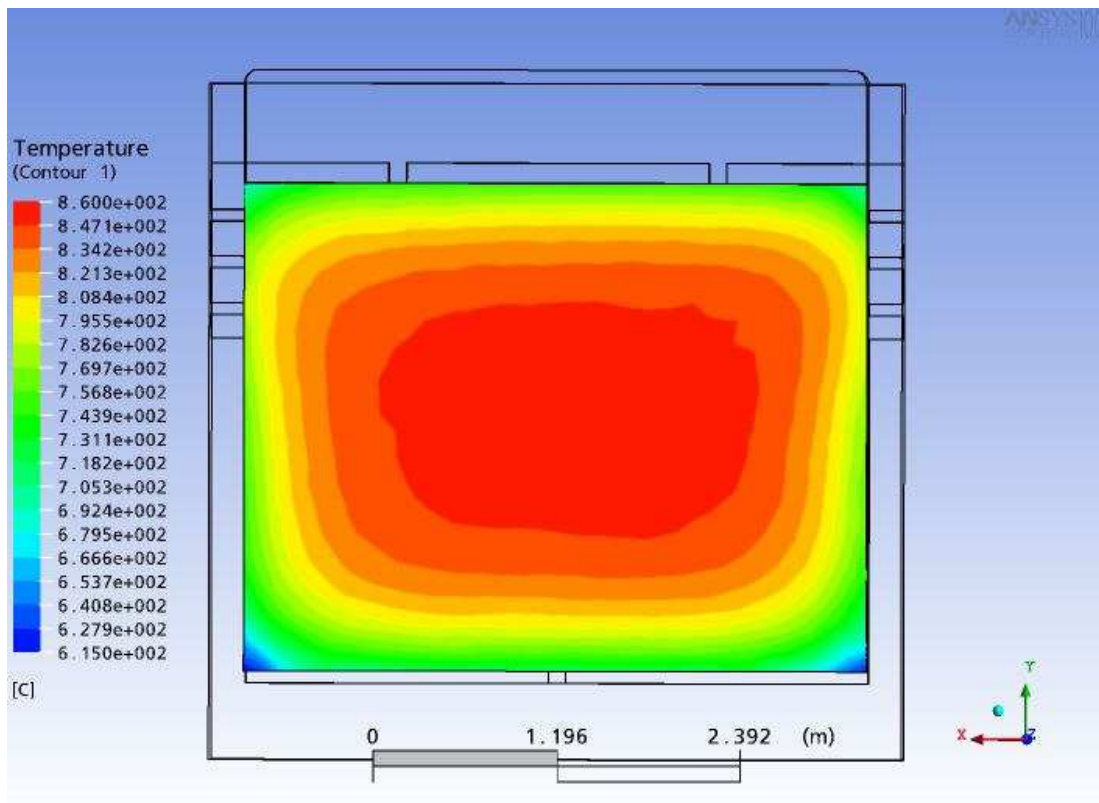


Figura 35 Perfil de temperatura no anodo para o 3º estágio com ciclo de 24h

Pode-se perceber que durante o pré-aquecimento, a diferença de tempos no ciclo de cozimento não altera o campo de temperatura nos anodos de carbono, mas somente a temperatura máxima e mínima do processo.

Para os quatro estágios de aquecimento, Figura 36 a Figura 43, além de ar à 1100 °C, uma vazão de diesel de 0.0172 m³/s alimenta a câmara de combustão. A partir deste ponto uma subrotina em FORTRAN controla a vazão de diesel injetada na câmara. Abaixo são mostrados os perfis de temperatura no anodo para cada um destes estágios de cozimento.

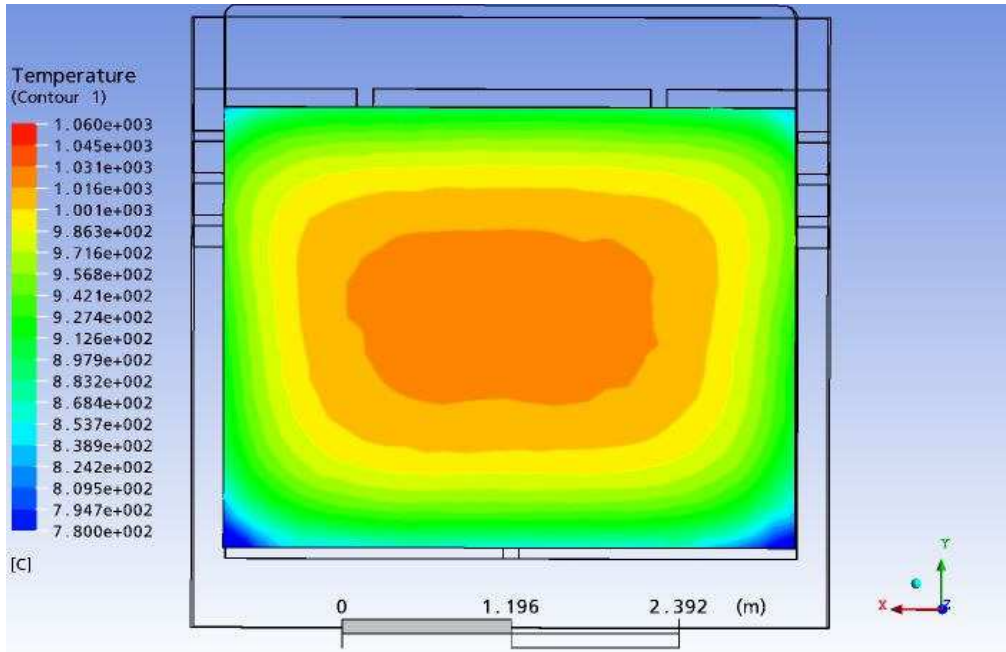


Figura 36 campo de temperatura no anodo para o 4º estágio com ciclo de 20h

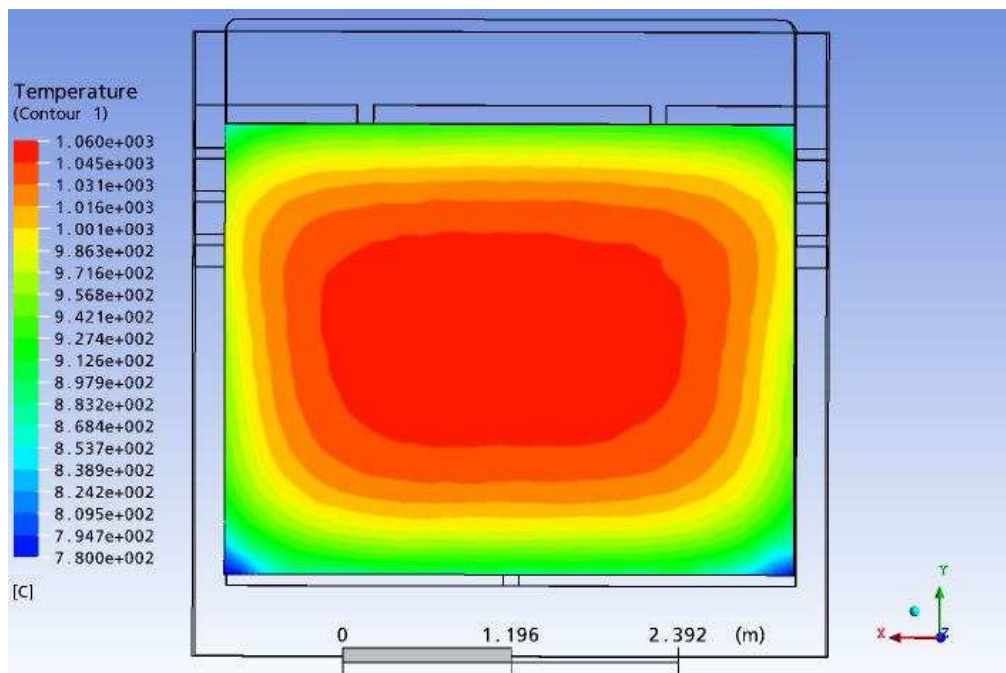


Figura 37 campo de temperatura no anodo para o 4º estágio com ciclo de 24h

As figuras a seguir, mostram o campo de temperatura após o segundo estágio de cozimento ou quinto estágio para os ciclo de 20h e 24h.

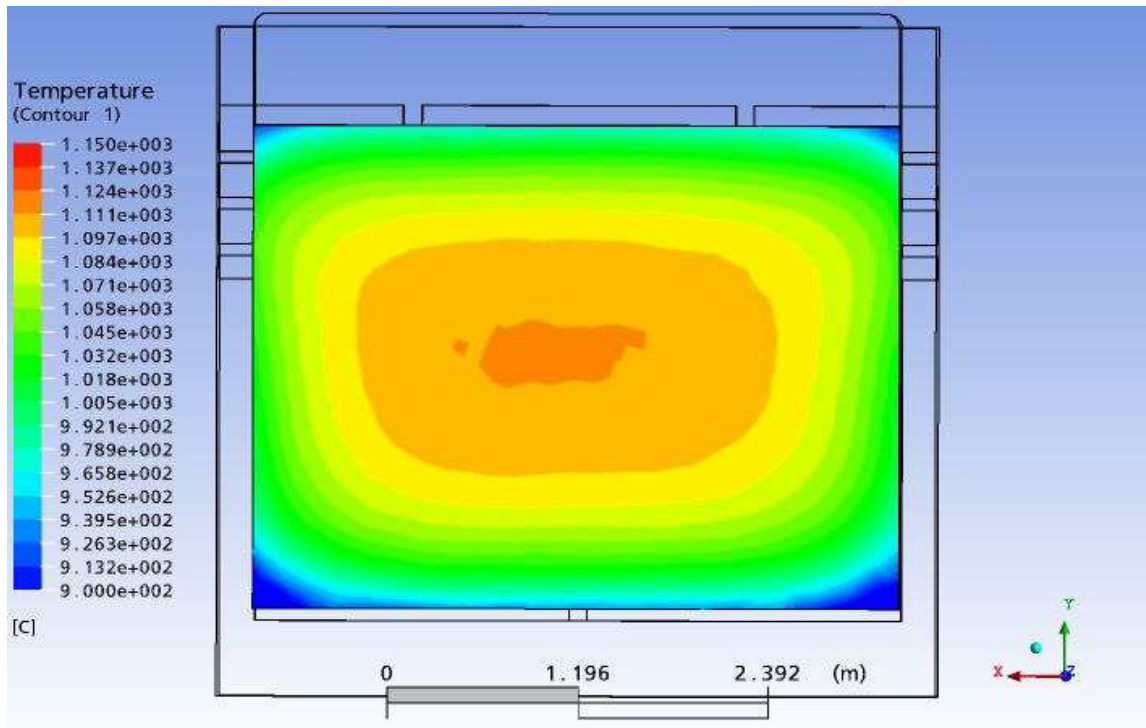


Figura 38 campo de temperatura no anodo para o 5º estágio com ciclo de 20h

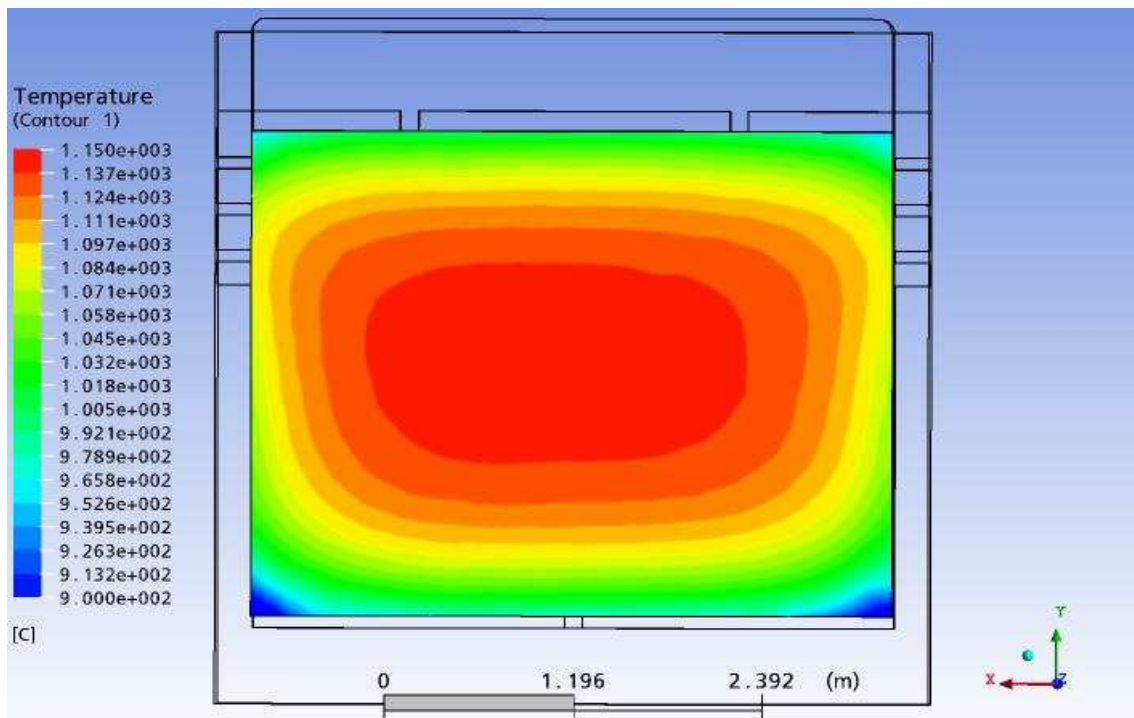


Figura 39 campo de temperatura no anodo para o 5º estágio com ciclo de 24h

As figuras abaixo, mostram o campo de temperatura após o terceiro estágio de cozimento ou sexto estágio para os ciclo de 20h e 24h, pode-se notar que um delta de temperatura começa a acentuar, em torno de 40°C.

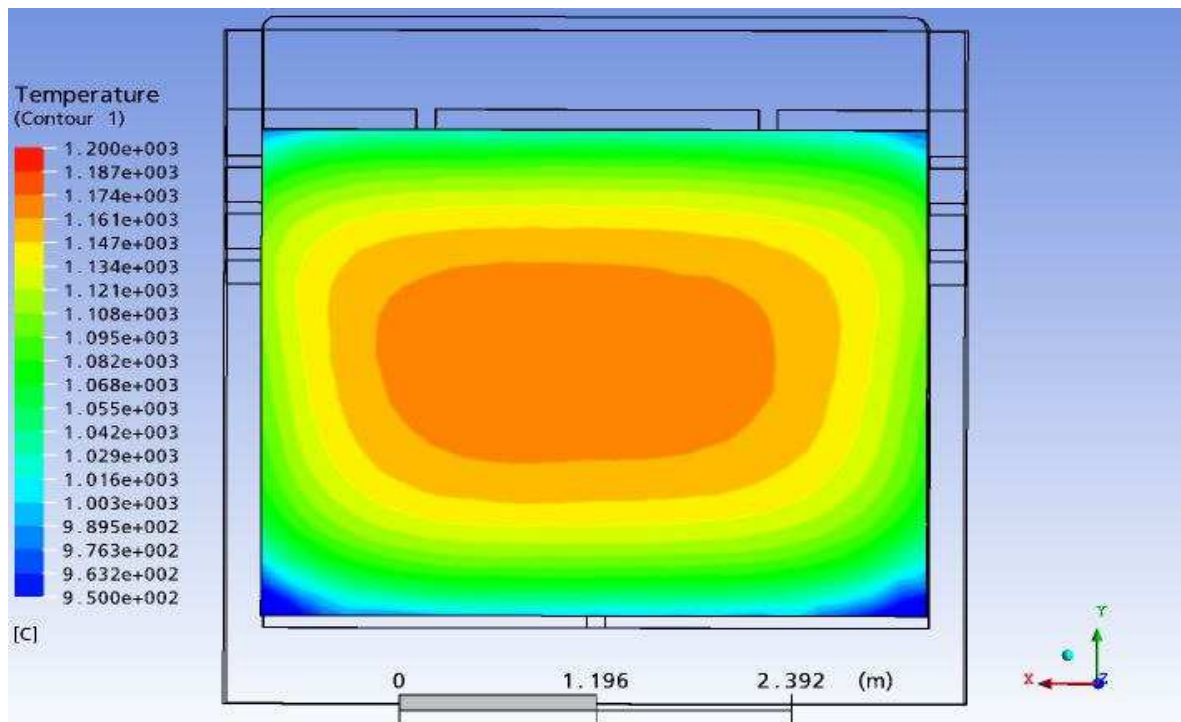


Figura 40 campo de temperatura no anodo para o 6º estágio com ciclo de 20h

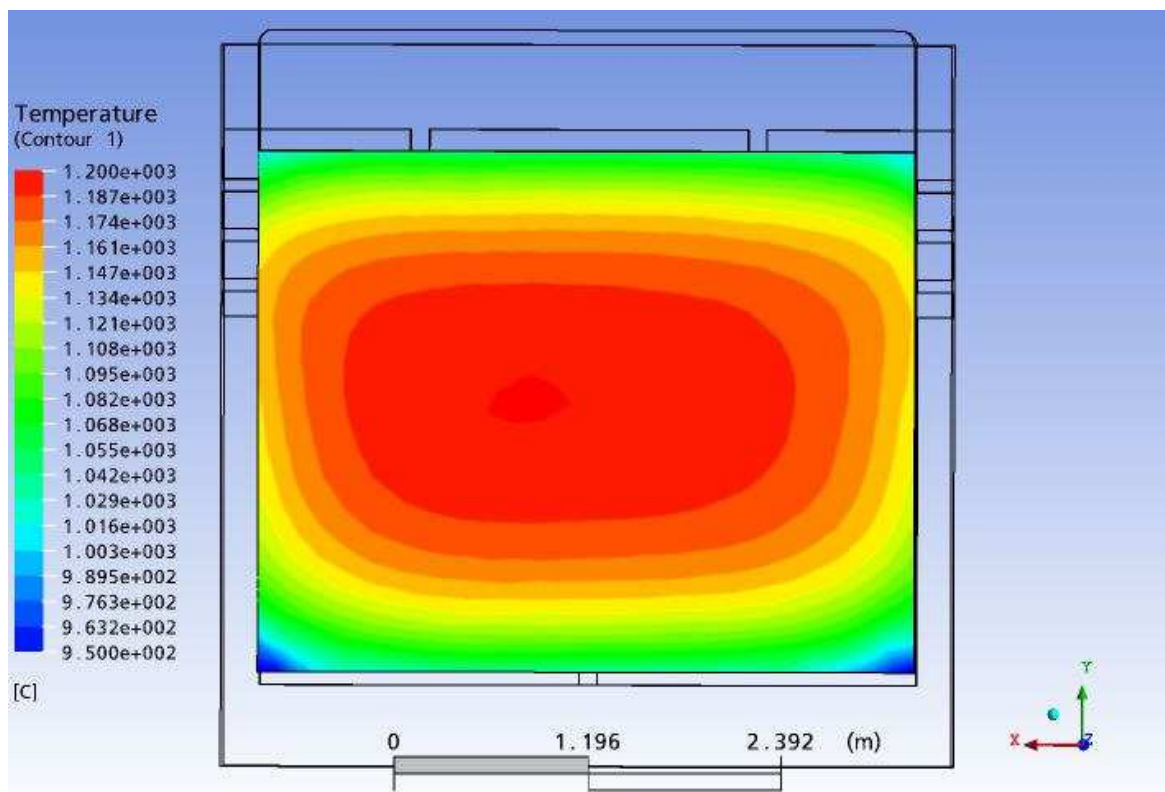


Figura 41 campo de temperatura no anodo para o 6º estágio com ciclo de 24h

Neste ciclo de cozimento , mostram o campo de temperatura após o quarto e ultimo estágio de cozimento para os ciclo de 20h e 24h, neste ultimo estágio, pode-se notar que um delta de temperatura permaneceu em torno de 40°C. No entanto as regiões “frias” nos cantos da câmara se acentuaram.

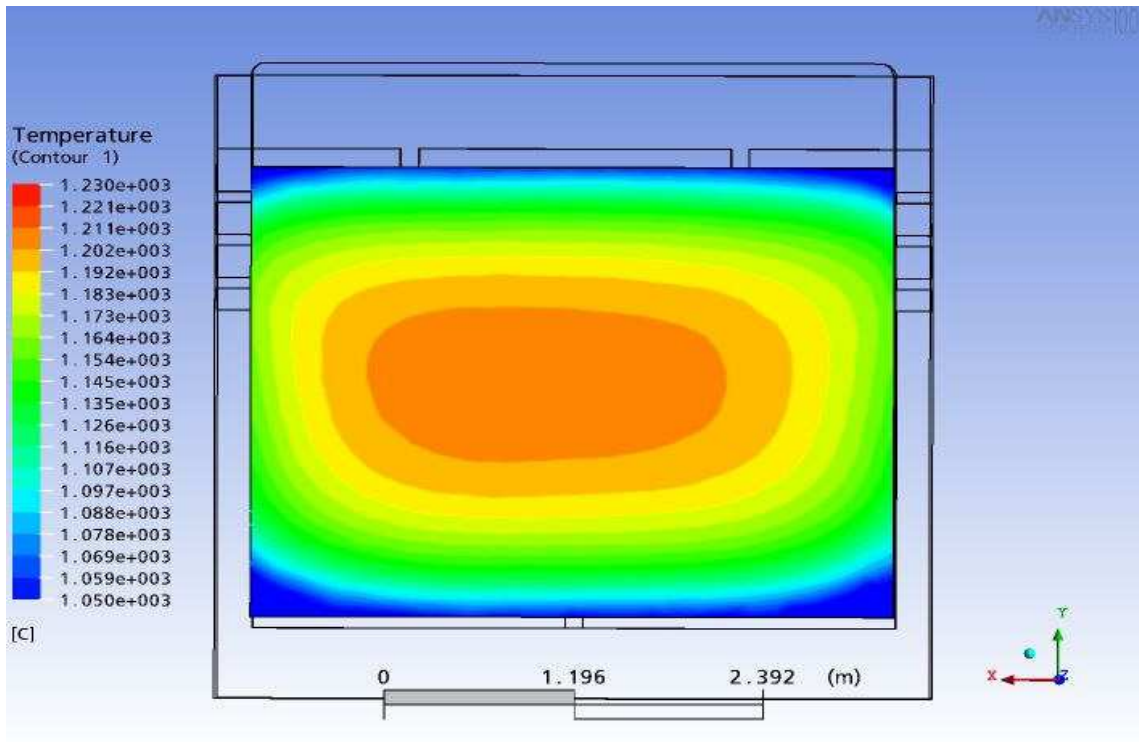


Figura 42 campo de temperatura no anodo para o 7º estágio com ciclo de 20h

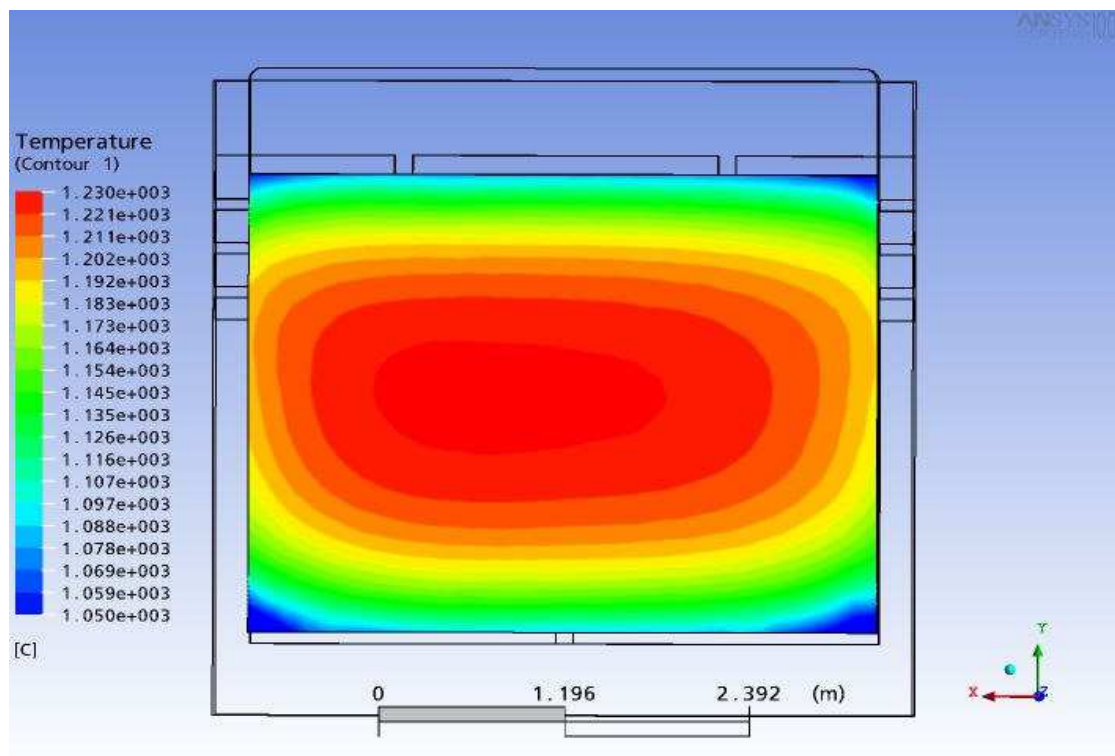


Figura 43 campo de temperatura no anodo para o 7º estágio com ciclo de 24h

No 1º estágio, Figura 30 e Figura 31, percebe-se que, inicialmente, o aquecimento é mais proeminente na região da entrada, o que é bastante razoável já que somente ar pré-aquecido entra na câmara. A partir do 2º estágio, Figura 23, o campo de temperatura assume a forma tradicional de apresentar maiores valores na região central. Dessa forma, do 2º ao 7º estágio a distribuição de temperatura é bem semelhante para todas as situações. Entretanto, nestes mesmos resultados, podemos ver claramente que o aumento de 4 h em cada estágio de cozimento causa uma diferença razoável na diferença de temperatura ΔT (máxima e mínima) alcançada em todo o anodo.

Para cada estágio o tempo computacional variou de 10 a 12 h de processamento, em uma máquina Intel Core2 Duo com 2 GB de memória RAM.

6 Conclusões

Tendo em vista os objetivos alcançados, os testes com os modelos fluidodinâmicos, mostraram que:

- A presença de tijolos internos altera bastante os perfis de velocidade na câmara, mas afetam pouca a distribuição de temperatura no anodo;
- Os resultados indicaram que a adição de uma camada extra de coque fluido sobre os anodos, não melhoram o delta T no mesmo.
- A perda de calor pelas bordas inferior e superior é o principal responsável pelo surgimento de gradientes de temperaturas mais elevados;
- O tempo para cada estágio de cozimento, 20h ou 24h, evidenciou que não afeta qualitativamente a distribuição temperatura no anodo, ou seja, continua formando regiões de altas temperaturas no centro do anodo. Mas afeta a taxa de aquecimento do anodo e a temperatura máxima e mínima no mesmo.
- O modelo fluidodinâmico em regime transiente pode ser usado para prever a distribuição de temperatura de acordo com: A geometria da câmara, a vazão e temperatura do combustível, a vazão e temperatura do ar e a curva de cozimento.

O modelo fluidodinâmico em regime transiente pode ser usado para prever a distribuição de temperatura em função do número de estágios e do tempo de cada estágio.

Estes resultados evidenciam que perda de calor pelas extremidades da câmara é a principal causa do elevado delta de temperatura no anodo, no entanto, é necessária a realização de outros estudos que possam corroborar os resultados obtidos neste trabalho, algumas sugestões seguem abaixo.

Sugestão de Trabalhos futuros:

- Estudar diferentes geometrias para a câmara alterando a posição dos tijolos internos;
- Estudar outros ciclos de cozimento, alterando o tempo de cada ciclo;
- Estudar a influencia de outras curvas de cozimento

7 Referências Bibliográficas

ARCHER, A. M.; DESCLAUX, P.; GILBERT, M. J. e LAROCQUE, J. E.. “Alumina to Aluminum: Bridging Two Process Streams”. Trabalho desenvolvido pela Alcan International. 1996.

BATISTA, ELIEZER. Avaliação do Sistema de Controle de Alimentação de Alumina na Alumar, Monografia de Graduação, Volta Redonda, 1997

BARTH, T. J., JESPERSON, D. C. The Design and application of Upwind Schemes on Unstructured Meshes AIAA Paper 89-0366, 1989.

BEÉR, J. M. and CHIGIER, N. A. COMBUSTION AERODYNAMICS, Applied Science Publishers Ltda, London, p.264, 1974.

BERTAUD, Y.; LECTARD, A. “Aluminium Pechiney Specifications for Optimising the Aluminas Used in Sidebreak and Point Feeding Reduction Pots”. Trabalho desenvolvido pela Aluminium Pechiney. 1996.

BIRD, R. B., STEWART, W. E. and LIGHTFOOT, E. N. Transport Phenomena John Wiley e Sons, pp. 780, 1960.

BURKIN, A. R.. “Production of Aluminium and Alumina. Critical Reports on Applied Chemistry”. Volume 20. 1ª edição. The Society of Chemical Industry. 1987.

CFX10.0 / Guia do Usuário do CFX versão 10.0 Ansys 2006.

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

DAMKOHLER, G. Jahrb. deut. Luftfahrtforsch Z. ELETROCHEM. 1940, p. 601. English Translation, NACA Tech. Memo 1112, 1947.

GENDRE, MAGALI. A Breakthrough in Anode Baking Furnace: FlueWall Design, Light Metals 2007.

GRJOTHEIM, K. e WELCH, B. J.. “Aluminium Smelter Technology”. 2ª edição. Aluminum-Verlag. 1988.

- GRJOTHEIM, Kai e KVANDE, Halvor. "Understanding the Hall-Héroult Process for Production of Aluminium". 1ª edição. Aluminum-Verlag. 1986.
- GRJOTHEIM, K.; Krohn, C.; MALINOVSKY, M.; MATIASOVSKY, K.; Thonstad, J..Aluminium "Eletrólisis Fundamentals of the Hall-Héroult Process". 2ª edição. Aluminium-Verlag. 1982.
- GRJOTHEIM, Kai; KVANDE, Halvor; ZHUXIAN, Qiu Key. "Improvements to Hall-Héroult Since the End of World War II". Artigo publicado pela revista JOM. Vol. 47. Nº 45. 1995.
- HOMSI, P.. "Alumina". Trabalho desenvolvido pela Aluminium Pecchiney-LRF. The International Course on Process Metallurgy of Aluminium. 1996.
- LAUNDER, B. E., REECE, G. J. and RODI, W. Progress in the Developments of a Reynolds-Stress Turbulence Closure Journal of Fluid Mechanics Vol. 68, pp. 537-566, 1975.
- LAUNDER, B. E. and SPALDING, D. B. The Numerical Computation of Turbulent Flows COMPUTER METHODS IN APPLIED MECHANICS AND ENGINEERING, 3:269-289, 1974.
- LIXING, Z. Theory and Numerical Modelling of Turbulent Gas-Particle Flows and Combustion Science Press, 1993. 231p.
- MALISKA, C. R. Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional LTC - Livros Técnicos e Científicos - Editora S.A., 1995.
- 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
- MENIUK, Daniel. "Capacitação Técnica no Processo de Produção do Alumínio". Trabalho desenvolvido pela ALUMAR. Recursos Humanos-Treinamento da Redução da ALUMAR. 1995.
- PATANKAR, S. V. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
- RAMOS, Marcos. "Estudo da Fase de Recuperação após Track nas Cubas da ALUMAR". ABAL. Trabalho apresentado no V Seminário de Tecnologia da Indústria do Alumínio. 1995.
- RONEL, J., BALIGA, P. F. A Finite Element Method for Unstead Heat Conduction in Materials with or whitout Phase Change AMERICAN SOCIETY OF MECHANICAL

- REVERDY, M.. “Potline Operation”. Trabalho desenvolvido pela Aluminium Pecchiney. The International Course on Process Metallurgy of Aluminium. 1995.
- RAITHBY, G. D. Equations Of Motions For Reacting, Particle Laden Flows THERMAL SCIENCE LTDA. Progress Report, 1991.
- TSUBAKI, Jorge. “Manual de Instrução - Processo de Produção de Alumínio ALBRÁS/MITSUI”. Trabalho desenvolvido pela Albrás - Alumínio Brasileiro S. A. 1983.
- SEVERO, DAGOBERTO. Advanced 3d Modeling For Anode Baking Furnaces, Light Metals 2005.
- SULGER, PETER. Technical report for Alumar, RD Carbon, Suíça – 2005.
- SPALDING, D. B. Mixing and Chemical Reaction in Steady Confined Turbulent Flames Thirteenth Symposium (International) on Combustion The Combustion Institute, pp. 649-657.
- 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.
- VERSTEEG, H. K., MALASEKERA, W. An Introduction to Computational Fluid Dynamics - The Finite Volume Method. England: Longmsn Group Ltda. 1995
- WALKER, M. L.; PURDIE, J.M.; WAI-POI, N.S.; WELCH, B. J. e CHEN, J. J. J.. “Design Considerations for Selecting the Number of Point Feeders in Modern Reduction Cells”. Artigo apresentado na revista Light Metals. Edited by J. Evans. 1995.
- ZHANG, H.; DE NORA, V.; SEKHAR, J. A.. “Materials used in the Hall-Hérout Cell for Aluminum Production”. TMS. 1ª Edição. 1994.

APÊNDICE A

Subrotina de Controle de Vazão


```
#include "cfx5ext.h"
```

```
dllexport(ac_on)
```

```
SUBROUTINE VAZAO (NLOC, NRET, NARG, RET, ARGS, CRESLT, CZ,DZ,IZ,LZ,RZ )
```

```
#include "parallel_partitioning.h"
```

```
INTEGER NLOC,NARG,NRET
```

```
CHARACTER CRESLT*(*)
```

```
REAL ARGS(NLOC,NARG), RET(NLOC,NRET)
```

```
INTEGER IZ(*)
```

```
CHARACTER CZ(*)*(1)
```

```
DOUBLE PRECISION DZ(*)
```

```
LOGICAL LZ(*)
```

```
REAL RZ(*)
```

```
CHARACTER*20 ROUTIN
```

```
PARAMETER(ROUTIN='HEAT_SOURCE')
```

```
INTEGER ILOC, NCLOOP
```

```
REAL TSET, TTHRSTAT, VALUE
```

C inicializar vazão desligada

```
DATA VALUE/0.0/
```

C initialize the variable that keeps track of the last time step

```
DATA NCLOOPLAST/-1/
```

```
SAVE VALUE
```

C Inicializar RET() para zero.

```
CALL SET_A_0( RET, NLOC*NRET )
```

```
TTHRSTAT = ARGS(1,1)
```

```
TSET = ARGS(1,2)
```

```
TDELTA = ARGS(1,3)
```

```
T_AT = ARGS(1,4)
```

```
T_INI_COZ = ARGS(1,5)
```

```
T_FIM_COZ = ARGS(1,6)
```

```
T1 = ARGS(1,7)
```

```
T2 = ARGS(1,8)
```

```
NCLOOP = INT(ARGS(1,9)+0.1)
```

```
IF (NCLOOP .EQ. 1) THEN
```

```
C   print *, ' Leitor de Temperatura   : ', TTHRSTAT
```

```
C   print *, ' Set point               : ', TSET
```

```
C   print *, ' Delta T                 : ', TDELTA
```

```
C   print *, ' contador de iteração de loops no tempo: ', NCLOOP
```

```
C   DEFINIÇÃO DA CURVA DE COZIMENTO
```

```
      IF ((T_AT .GE. T1).AND.(T_AT .LE. T2) THEN
```

```
          TSET = 9.39*T_AT + 233.60
```

```
      ELSE IF(T_AT .GE. T2) THEN
```

```
          TSET = 1230.0
```

```
      ELSE
```

```
          TSET = 0.0
```

```
      END IF
```

```
      IF (T_AT .LE. T_INI_COZ) THEN
```

```
          VALUE = 0.0
```

```
      ELSE IF ((T_AT .GE. T_INI_COZ).AND.(T_AT .LE. T_FIM_COZ) THEN
```

```
          IF (TTHRSTAT .GE. TSET) THEN
```

```
C   Desligar injeção de Diesel
```

```
          VALUE = 0.0
```

```
ELSE IF (TTHRSTAT .LE. ( TSET - TDELTA ) ) THEN
```

```
C    Ligar injeção de Diesel
```

```
        VALUE = 1.0
```

```
    ENDIF
```

```
ELSE IF(T_AT . GE. T_FIM_COZ) THEN
```

```
        VALUE = 0.0
```

```
ENDIF
```

```
ENDIF
```

```
DO ILOC = 1, NLOC
```

```
    RET(ILOC,1) = VALUE
```

```
ENDDO
```

```
C    print *, 'AC_ON returns:', VALUE
```

```
C Set success flag.
```

```
    CRESLT = 'GOOD'
```

```
END
```