

INFLUÊNCIA DO TIPO DE OXIDANTE NA COMBUSTÃO DO GÁS NATURAL EM UM FORNO DE REFUSÃO DE ALUMÍNIO

Aluno: Rafael Cezar Menezes
Orientador: Angela O. Nieckele

Introdução

Há diversas aplicações industriais da combustão que podem se beneficiar do uso do ar enriquecido de oxigênio ou oxigênio puro como o oxidante durante o processo da combustão. Os efeitos são muitos. O oxigênio enriquecido aumenta a temperatura da chama, promove a formação da fuligem e a oxidação, e pode diminuir as emissões do poluente comparadas com os sistemas de hidrocarboneto-ar

A formação de óxidos de nitrogênio (NO_x) em sistemas de combustão por alimentação do ar representa uma fonte significativa para este poluente dentro do setor industrial. Com o aumento na utilização de combustíveis fósil no mundo, o controle de emissões de NO_x transformou-se num assunto de interesse global. Adicionalmente, com preços de óleo crescentes, o uso de combustíveis de uma qualidade mais baixa tornará o problema mais grave. Os avanços em ferramentas computacionais e o aumento do desempenho dos computadores permitiram o desenvolvimento de modelos detalhados para prever a formação e destruição de NO_x, levando a compreensão dos processos da reação de NO_x em sistemas da combustão [1].

Hill e Smoot [1] apresentaram uma revisão no modelo de reações de NO_x em sistemas de combustão, com uma ênfase em sistemas queima de carvão, incluindo tecnologia de controle de NO_x, processo de reação de NO_x, e técnicas para calcular a cinética química em chamas turbulentas. Os modelos da formação de NO_x em sistemas da combustão foram revistos. As comparações de valores medidos e preditos de concentrações de NO_x foram apresentadas para diversos sistemas de escala completa e escala de laboratório.

Modelagem numérica transformou-se numa ferramenta importante no projeto e na otimização de equipamentos industriais e também na predição da emissão dos poluentes tais como CO (monóxido de carbono), SO_x (óxidos do enxofre), e NO_x. Recentemente, diversos estudos numéricos [2-10] foram desenvolvidos para analisar o processo da combustão com combustíveis diferentes, usando o ar puro, o oxigênio ou uma mistura de ambos como o oxidantes. Estes estudos forneceram descrições detalhadas para os campos da concentração da temperatura, da velocidade e da concentração de espécie dentro das várias geometrias do equipamento de combustão industrial.

O trabalho de Yang e de Blasiak [2] descreveu o modelo de CFD da combustão do gás propano liquefeito (LPG) com ar altamente pré-aquecido em um sistema regenerativo do queimador. Os resultados para vários parâmetros, incluindo a temperatura da parede do forno e a concentração de espécies gasosa, foram obtidos para uma fornalha semi-industrial. Os resultados indicaram que a propagação da chama poderia bem ser predita usando o modelo numérico. Encontrou-se também que o queimador regenerativo poderia fornecer uma economia de energia elevada e abaixar emissões do NO.

Em Frassoldati et al. [3], a atenção foi focalizada em um procedimento novo, baseado no CFD, para a determinação de emissões de NOx nos processos de combustão, que permitiu o uso de esquemas muito detalhados da reação. O procedimento foi validado para o caso de chamas difusas de gás natural com escoamento altamente rotacional, com dados experimentais disponíveis da alemã TECFLAM [4] para for um queimador de 150 kW.

Wang et al. [5] desenvolveram um modelo detalhado do CFD integrando procedimentos para química detalhados, formação e oxidação da fuligem, e radiação térmica, em um código desestruturado tridimensional do CFD. A cinética química detalhada foi modelada usando 122 espécies químicas e 677 reações elementares. O modelo foi aplicado a uma chama turbulenta não misturada de oxigênio-enriquecido com propano. Os resultados mostraram que a radiação da fuligem diminuiu substancialmente a temperatura da flama e emissões de NOx, especialmente na região de quebra da chama. Investigaram também a importância de modelar os efeitos da radiação para predição da fuligem e a formação de NOx.

Nieckele et al. [6] descreveu uma simulação numérica do processo de combustão com 100% de oxigênio dentro de um forno industrial de re-fusão de alumínio. Três configurações diferentes foram analisadas incluindo a comparação entre processos estagiados e não estagiados. O procedimento numérico foi baseado na formulação do modelo de volume finito e no modelo κ - ϵ de turbulência. A combustão foi modelada baseada nos modelos finitos da taxa de Arrhenius e de Magnussen, e o modelo discreto da radiação de transferência foi empregado predizendo transferência de calor da radiação. As predições numéricas permitiram a determinação dos testes padrões da chama, da distribuição da concentração da espécie, da temperatura e dos campos da velocidade.

O campo do fluxo dentro do forno de alumínio com diferentes tipos de queimadores e condições de operação foi analisado em [6, 7]. Também, a investigação numérica e experimental em um forno industrial de fusão de alumínio com combustão do oxigênio enriquecido foi realizada em [8]. A distribuição da temperatura nas paredes refratárias foi verificada. O modelo superestimou a mistura turbulenta e, por outro lado, as concentrações do CO (monóxido de carbono) foram subestimadas perto da região do queimador, provavelmente porque os efeitos cinéticos foram negligenciados. As simulações numéricas dentro de um queimador industrial em um forno de fusão de alumínio foram realizadas também em [9]. Mostrou-se que a altura da chama cresce com a velocidade do combustível para uma relação dada de ar-combustível, e com a redução da velocidade do ar, para uma velocidade dada do combustível. Em [10], a turbulência das chamas do gás num forno cilíndrica foi simulada, usando taxas de modelos finitos e modelando reações químicas em duas maneiras diferentes: em uma maneira simples, onde a combustão do combustível fosse predita em uma única reação global; e com um processo de duas etapas, onde o monóxido de carbono poderia ser predito em uma reação intermediária. Os resultados para ambos os modelos mostraram um bom acordo com os dados experimentais encontrados na literatura, embora se observasse que os fenômenos físicos estiveram melhor descritos pela reação de duas etapas.

No trabalho atual, as simulações numéricas foram realizadas usando o pacote comercial FLUENT, a versão 6.2 [11], para determinar a distribuição do campo de fluxo, da espécie e da distribuição da temperatura dentro de um forno industrial de alumínio, empregando o ar e o oxigênio puro para a combustão do gás natural. As vantagens e as desvantagens de cada tipo de oxidante são mostradas.

Metodologia

A geometria do forno está representada como um prisma retangular de 4,0 m de comprimento, 1,5 m de largura e 2,0 m de altura, mostrado na Fig. 1. Fig. 2 ilustra os detalhes do plano frontal, e uma visão diferente da configuração interna. Devido à simetria, somente metade do forno foi resolvida.

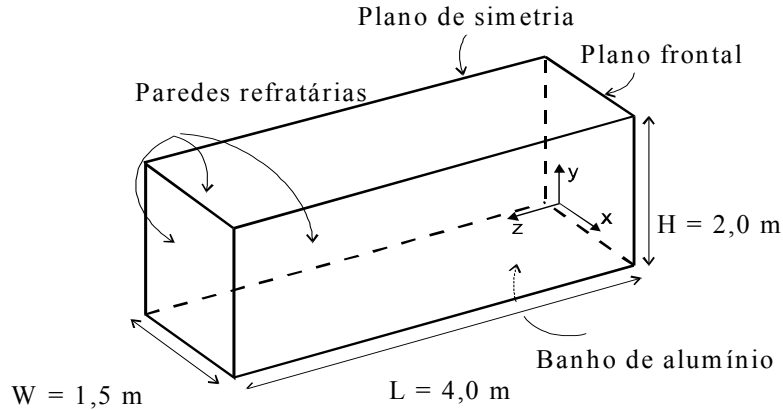


Fig. 1: Esquema do forno e geometria

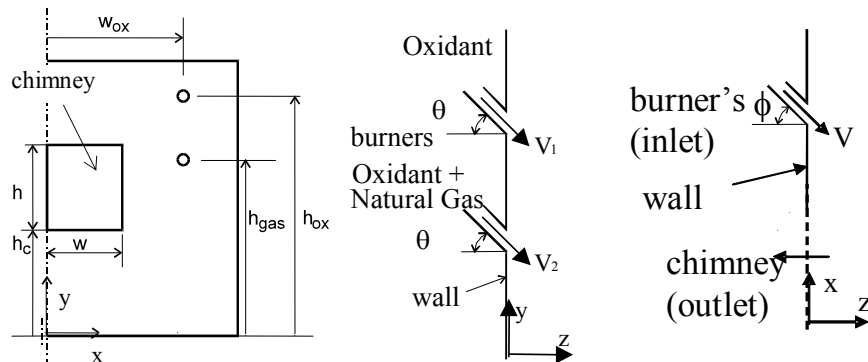


Fig. 2: Injeção e geometria da chaminé

O limite inferior do forno foi considerado como uma superfície líquida de alumínio com pequenas camadas de óxido de alumínio de 0,5 m acima desta. A camada de óxido de alumínio foi considerada para descrever a oxidação da superfície de alumínio pela água resultante da combustão, que pode agir como isolante e pode comprometer a qualidade do produto.

O plano de simetria vertical passa pelo centro da chaminé entre os dois pares de oxidante e injetores de combustível. As entradas de oxidante e combustível assim como a saída do produto da combustão estão localizadas na mesma parede (Fig. 2). O centro do queimador está localizado 0,65 m acima da camada de óxido de alumínio e 0,8 m afastado do plano de simetria. Combustível é injetado no centro e o oxidante cerca-o. O injetor do oxidante é localizado 0,20m acima do queimador. Ambos queimador e oxidante são formados por uma abertura central e pequenos orifícios que cercam a abertura central, que aqui é representado por uma abertura anular.

Dois casos foram analisados, ambos com gás natural como combustível um com oxigênio como oxidante e outro com o ar como oxidante. A geometria interior do oxidante depende do tipo de oxidante. O queimador do gás natural tem uma abertura central de área igual a $2,89 \times 10^{-4} \text{ m}^2$

para ambos os casos. Para o caso com o oxigênio como oxidante, a lança do oxidante e o queimador têm a mesma geometria e a área de abertura anular igual a $1,38 \times 10^{-3} \text{ m}^2$.

Para o caso do ar como oxidante, uma taxa de fluxo maior é necessária. Conseqüentemente, as áreas da entrada são maiores para manter a mesma ordem de valor da velocidade na entrada. Nesse caso, na lança do oxidante a área da abertura central é igual a $2,13 \times 10^{-3} \text{ m}^2$. As áreas da abertura anular para ambas as lanças são igual a $3,53 \times 10^{-3} \text{ m}^2$. Os jatos são direcionados para o plano central, se afastando das paredes refratárias, com ângulos de 15° no plano vertical e 10° no plano horizontal. A altura do centro da chaminé retangular coincide com a aquela para o centro do queimador, sua meia largura mede 0,50m e suas medidas da altura 0,60m.

Considerando uma carga de alumínio típica de 16 toneladas (que corresponde a um volume de 6 m^3), supondo um tempo de processo aproximado de 1 hora, e sabendo que o calor latente de alumínio é 397,4 kJ/kg, uma taxa de transferência do calor de 880 kW deve ser extraída da superfície de alumínio, a fim de representar a energia necessária para derreter toda quantidade de alumínio.

A composição do gás natural típico pode ser encontrada na tabela 1, onde o peso molecular M_i , o h_i° da entalpia de formação e o calor específico à pressão constante c_{p_i} são indicados [12]. As propriedades do oxigênio e do ar e a concentração interna de massa são apresentadas também na tabela 1.

A viscosidade absoluta do gás natural foi ajustada como $\mu = 1,72 \times 10^{-5} \text{ Pa s}$, enquanto a condutividade térmica $k = 0,0241 \text{ W/(m K)}$. O coeficiente de difusão de todas as espécies em todas as misturas foi igual ao coeficiente de difusão do N_2 , $2,88 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$. O calor específico das misturas foram obtidas por uma média de fração mássica.

	Espécies	% m_i	M_i	h_i° kJ/kg	c_{p_i} J/(kg K)
Natural Gas	CH_4	70.3	16	-74 895	2 222
	C_2H_6	17.8	30	-83 863	1 731
	C_3H_8	0.69	44	-103 860	1 549
	CO	0.00	28	-110 530	1 043
	CO_2	6.93	44	-39 353	840
	N_2	4.28	28	0.0	1 041
Oxigênio	O_2	100	32	0.0	919
Ar	O_2	23	32	0.0	919
	N_2	77	28	0.0	1 041

Tab. 1: Propriedade das espécies

O escoamento turbulento e a transferência de calor dentro do forno foram resolvidos numericamente usando a técnica de volume finito e o pacote comercial FLUENT, versão 6.2. As fórmulas médias das equações de conservação de massa e do momento são dados por:

$$\text{div}(\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (1)$$

$$\text{div}(\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = \text{div}[\mu_{\text{ef}} (\text{grad } \mathbf{v} + (\text{grad } \mathbf{v})^T)] - \text{grad } P \quad (2)$$

onde ρ é a densidade, \mathbf{v} é o vetor velocidade, e $\mu_{ef} = \mu + \mu_t$ é a viscosidade efetiva, obtida pela hipótese do Boussinesq. A pressão total modificada $P = p - (2/3) [\mu_{ef} \mathbf{div} \mathbf{v} + \rho \kappa]$, takes into account the contributions devido as flutuações turbulentas.

O modelo de turbulência κ - ϵ foi usado para calcular a viscosidade turbulenta, que é definida como $\mu_t = c_\mu \rho \kappa^2 / \epsilon$, onde κ é a energia cinética turbulenta e ϵ a dissipação para a energia cinética turbulenta. A equação de conservação do κ e ϵ são dadas por:

$$\mathbf{div}(\rho \mathbf{v} \kappa) = \mathbf{div} \left[(\mu + \mu_t / Pr_\kappa) \mathbf{grad} \kappa \right] + (G - \rho \epsilon) \quad (3)$$

$$\mathbf{div}(\rho \mathbf{v} \epsilon) = \mathbf{div} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_\epsilon} \right) \mathbf{grad} \epsilon \right] + (c_1 G - c_2 \rho \epsilon) \frac{\epsilon}{\kappa} \quad (4)$$

Nas equações acima, Pr_κ e Pr_ϵ são o número de Prandtl turbulento para o κ e ϵ , e foram ajustados iguais a 0.7. As constantes foram dadas como $c_1=1.4$, $c_2=1.9$, e $c_\mu=0.09$. O termo $G = \mu_t [\mathbf{grad} \mathbf{v} + (\mathbf{grad} \mathbf{v})^T]$ o $\mathbf{grad} \mathbf{v}$ é a geração da energia cinética turbulenta. As equações acima foram resolvidas simultaneamente com as equações de conservação de massa e do momento, fornecendo a solução para o problema do fluxo turbulento.

A densidade da mistura gasosa foi calculada usando a lei do gás ideal, $\rho = p_{op} / [RT \sum_i (m_i/M_i)]$, onde o p_{op} é a pressão média da operação dentro do forno, que é para ser igual a uma atmosfera.

Para todas as variáveis dependentes utilizou-se leis de parede para se ajustar as condições perto dos limites contínuos, seguindo o procedimento descrito em [13] e [14].

O campo da temperatura dentro do forno foi obtido resolvendo a equação da energia:

$$\mathbf{div}(\rho \mathbf{v} h) = \mathbf{div} \left[\left(\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \mathbf{grad} h \right] + S_h \quad (5)$$

onde a entalpia total h é definido pela soma das entalpias para cada espécie h_i pesando pela sua fração mássica m_i ,

$$h = \sum_i m_i h_i \quad ; \quad h_i = \int_{T_{ref,j}}^T c_{p,j} dT + h_j^0(T_{ref,j}) \quad (6)$$

e o h_j^0 é a entalpia de formação na temperatura de referência, $T_{ref,j}$ e $c_{p,j}$ é o calor específico a pressão constante da espécie j . O termo $S_h = S_{reac} + S_{rad}$, representa a fonte de entalpia devido às reações químicas (combustão) e à transferência de calor por radiação. O número de Prandtl turbulento, Pr_t , foi ajustado em 0,5.

O termo fonte na equação da energia devido à radiação foi calculado usando o modelo discreto de transferência por radiação (DTRM). Neste modelo, a intensidade radiante I é integrada sobre todos os comprimentos de onda ao longo da trajetória S , de acordo com $dI/dS = -\alpha I + \alpha \sigma T^4/\pi$. Os termos no lado esquerdo representam a perda por absorção e o ganho pela emissão devido ao meio participante, respectivamente.

O modelo integra a expressão acima ao longo de diversas direções que partem de cada volume do controle nas superfícies do domínio. O termo fonte S_{rad} é calculado localmente somando as mudanças na intensidade para todos os raios que cruzam o volume do controle. O

peso da soma do modelo cinzento dos gases (WSGGM) foi usada para o cálculo do coeficiente de absorção[15].

A taxa do modelo finito generalizado, combinado com o modelo de Arrhenius-Magnussen [11-12], foi selecionada para obter o termo fonte devido às reações químicas na equação da energia. A distribuição das espécies químicas são obtidas através da solução das equações de conservação de transporte n-1, onde n representa o número da espécie. A fórmula geral da equação de conservação para cada espécie química é dada por

$$\text{div}(\rho \mathbf{v} m_i) = \text{div}[(\mu/Sc + \mu_t/Sc_t)\mathbf{grad} m_i] + R_i + S_i \quad (7)$$

Na equação acima, o termo R_i e o S_i representam as fontes para cada espécie. O primeiro é associado com as transformações devido às reações químicas, e o seguinte pode representar a adição da fase dispersada. O termo R_i , pode ser expresso pela soma das taxas da reação (geração ou consumo) para a espécie i em cada reação k , como denotado por $R_{i,k}$, de acordo com $R_i = \sum_k R_{i,k}$. O efeito turbulento é levado em consideração pelo coeficiente de difusão turbulenta, μ_t/Sc_t , onde o número de Schmidt turbulento Sc_t foi ajustado igual a 0,5.

Com o modelo combinado de Arrhenius-Magnussen, as taxas das reações de combustão são determinadas pelo menor valor entre o Arrhenius e os modelos de Magnussen, que são dadas respectivamente por

$$R_{i,k} = \eta_{i,k} M_i T^{\beta_k} A_k \exp(-E_k/RT) \prod_j C_j^{\gamma_{j,k}} \quad (8)$$

$$R_{i,k} = \eta_{i,k} M_i K_1 \rho^{\frac{\varepsilon}{k}} \min \left[\frac{m_{j^*}}{\eta_{j^*,k} M_{j^*}}; K_2 \frac{\sum_p m_p}{\sum_p \eta_{p,k} M_p} \right] \quad (9)$$

Nestas expressões o j^* representa o reagente que dá o menor valor para $R_{i,k}$, e K_1 e K_2 são as constantes empíricas, ajustadas como 4.0 e 0.5, respectivamente.

Dois casos foram considerados, no primeiro, oxigênio puro foi empregado como o oxidante quando para o segundo caso, ar foi usado como o oxidante. Para ambos os casos, o gás natural foi empregado como o combustível. Um mecanismo de quatro etapas foi selecionado, como mostrado na tabela 2.

Os coeficientes estequiométricos para cada reação devem ser especificados de acordo com as equações na tabela 2. A expressão da taxa da reação de Magnussen não requer nenhuma informação adicional. Os parâmetros para modelos de Arrhenius e de Arrhenius-Magnussen são mostrados na tabela 3, onde β_k foi dado como zero para todas as reações. A unidade de A_k é $(\text{m}^3/\text{s})/\text{kmol}$ e para E_k são MJ/kmol.

Reações	
1	$\text{CH}_4 + 3/2 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + 2 \text{H}_2\text{O}$
2	$\text{CO} + 1/2 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$
3	$\text{C}_2\text{H}_6 + 7/2 \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{CO}_2 + 3 \text{H}_2\text{O}$
4	$\text{C}_3\text{H}_8 + 7/2 \text{O}_2 \rightarrow 3 \text{CO} + 4 \text{H}_2\text{O}$

Tab. 2: Reações

Reações	A_k	E_k	$\gamma_{C□□}$	$\gamma_{C_2H_6}$	$\gamma_{C_3□□}$	γ_{O_2}	γ_{CO_2}	γ_{CO}	γ_{H_2O}
1	5.01×10^{11}	200	0.7	-	-	0.8	-	0	0
2	2.24×10^{12}	170	-	-	-	0.25	0	1	-
3	6.19×10^9	126	-	0.1	-	1.65	0	-	0
4	5.62×10^9	126	-	-	0.1	1.65	-	0	0

Tab. 3: Parameters for each reaction for the Arrhenius reaction rate expression, Eq. (11)

A concentração de NOx é predita usando o pós processador de NOx FLUENT [11]. A espécie de NOx pode ser excluída do cálculo do equilíbrio porque está presente em concentrações baixas e tem pouco impacto na densidade, na temperatura e em outra concentração de espécie. A formação térmica de NOx é calculada usando o mecanismo de extensão de Zeldovich, desenvolvida por Zeldovich em 1946 e descrita em Tomeczek e Gradon [16]. As taxas da reação foram obtidas da avaliação de Hanson e de Salimian [17]. A presença de um segundo mecanismo para criar NO durante o processo da combustão foi identificada primeiramente por Fenimore [18] e denominado por “prompt NO”. O mecanismo de reação do NO é mais importante em chamas ricas. No modelo de reação atual de NOx, foi usado um parâmetro cinético global e um procedimento desenvolvidos por De Soete [19].

As emissões de NOx são previstas resolvendo uma equação do transporte para concentração de óxido nítrico (NO), usando um escoamento dado, temperatura e campo de espécie. Neste trabalho somente os mecanismos térmicos e prompt para a formação de NOx foram considerados. Conseqüentemente, somente a equação do transporte da espécie do NO tem que ser resolvida:

$$\text{div}(\rho \mathbf{v} m_{NO}) = \text{div}(\rho \mathbf{D} \text{grad} m_{NO}) + S_{NO} \quad (10)$$

O termo fonte S_{NO} é dado por:

$$S_{NO} = M_{w,NO} \frac{d[NO]}{dt} \quad (11)$$

onde $M_{w,NO}$ é o peso molecular do NO (kg/gmol), e $d[NO]/dt$ é a taxa de formação de NO para cada caso [11].

Para o mecanismo térmico de NOx, negligenciando a concentração do OH, as reações principais são:



Supondo um estado quase permanente, a taxa da formação do NO é dada por:

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2 k_{f,1} [O][N_2] \frac{\left(1 - \frac{k_{r,1} k_{r,2} [NO]^2}{k_{f,1} [N_2] k_{f,2} [O_2]}\right)}{\left(1 + \frac{k_{r,1} [NO]}{k_{f,2} [O_2]}\right)} \quad (13)$$

onde [O], [NO], [O2], e [N2] são a concentração de [i] átomos, e $k_{i,j}$ são constantes empíricas

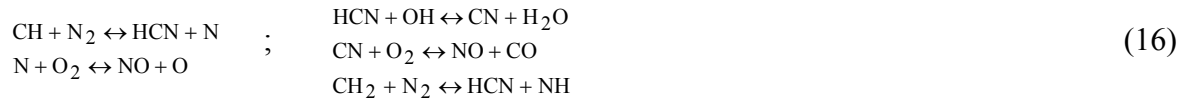
[17], dada por:

$$\begin{aligned} k_{f,1} &= 1.8 \times 10^8 e^{-38370/T} & k_{f,2} &= 1.8 \times 10^4 e^{-4680/T} \\ k_{r,1} &= 3.8 \times 10^7 e^{-425/T} & k_{r,2} &= 3.81 \times 10^3 T e^{-20820/T} \end{aligned} \quad (14)$$

A aproximação do equilíbrio foi empregada como sugerida por Zeldovich [16]. Conseqüentemente, o mecanismo térmico da formação de NOx pode ser desacoplado do processo principal da combustão, e a taxa da formação de NOx é calculada supondo o equilíbrio da reação da combustão. A concentração do átomo oxigênio é dada por:

$$[O] = 3.97 \times 10^5 T^{-1/2} [O_2]^{1/2} e^{-31090/T} \quad \text{gmol/m}^3 \quad (15)$$

Para o mecanismo da reação do NOx, as reações são:



Para combustível hidrocarboneto, a taxa de formação do NO deve ser calculada por:

$$\frac{d[\text{NO}]}{dt} = f k'_{pr} [\text{O}_2]^a [\text{N}_2] [\text{FUEL}] e^{-E'_a/RT} \quad (17)$$

onde $f = 4,75 + 0,0819 n - 23,2 \varphi + 32 \varphi^2 - 12,2 \varphi^3$, $k'_{pr} = 6,4 \times 10^6 (RT/p)^{a+1}$ e $E'_a = 303474,125$ J/gmol. n é o número de átomos de carbono por molécula para o combustível de hidrocarboneto, φ é a relação de equivalência, a é a ordem da reação do oxigênio, que depende das condições da chama. Para $N_{O_2} \geq 4,1 \times 10^{-3}$, a é igual a um e acima de $0,03$ é zero, então

$$a = \begin{cases} -3,95 - 0,9 \ln N_{O_2} & ; \quad 4,1 \times 10^{-3} \leq N_{O_2} \leq 1,11 \times 10^{-2} \\ -0,35 - 0,1 \ln N_{O_2} & ; \quad 1,11 \times 10^{-2} \leq N_{O_2} \leq 0,03 \end{cases} \quad (18)$$

Sendo o fluxo sob a análise turbulenta, as flutuações da temperatura e da composição são levadas em conta considerando funções da densidade da probabilidade. No modelo de NOx FLUENT, um único ou junção-variável PDF em termos de uma combinação de uma temperatura normalizada e fração mássica da espécie, é usado para prever a emissão de NOx. A taxa de produção turbulenta média do NO, é dada por:

$$\bar{S}_{NO} = \int \dots \int S_{NO}(V_1, V_2, \dots) P(V_1, V_2, \dots) dV_1 dV_2 \dots \quad (19)$$

onde V_1, V_2, \dots são as concentrações da temperatura e da espécie, P é a função da densidade da probabilidade, e S_{NO} é a taxa de produção instantânea, dada pelo eq. (11). Esta equação deve ser integrada em cada nó e em cada iteração.

Resultados

O campo de fluxo dentro do forno foi obtido numericamente para os dois tipos de oxidante. A solução foi considerada convergida quando a soma dos resíduos normalizados de todas as equações deu menos que 10^{-4} e o resíduo normalizado da entalpia menos que 10^{-6} .

A distribuição da malha foi gerada com o GAMBIT, ferramenta auxiliar do FLUENT (Fluent, 2005) [11]. Um teste da malha foi executado, dobrando e reduzindo em 50% o número dos pontos em cada sentido. A malha foi considerada satisfatória para uma diferença menor que 3% da temperatura máxima. Após o teste da malha, uma malha aproximadamente uniforme de 134.400 volumes do controle, com 60 elementos de $60 \times 40 \times 56$ elementos na direção de x, de y, e de z, respectivamente, foi selecionado. O menor tamanho da grade foi igual a 2 milímetros.

O oxigênio puro foi selecionado inicialmente como o oxidante. Para realizar a fusão de 16 toneladas do alumínio em uma hora, um poder térmico nominal igual a 1,2 MW por queimador foi especificado, a fim de representar ambos a energia necessária para derreter a carga inteira do alumínio, mas também as perdas de calor possíveis inerentes no processo. Sendo o poder calorífico superior do gás natural o H_{CI} igual a 44,8 MJ/kg, a taxa mássica de fluxo do combustível foi ajustada como 96,1 kg/h, que corresponde a uma velocidade de entrada do combustível de 126 m/s. A relação de oxidante-combustível foi definida estequiometricamente, conduzindo a uma taxa de fluxo de massa de O_2 igual a 342 Kg/h.

A fração mássica de O_2 no ar é igual a 23%, conseqüentemente, para o segundo caso, que empregou o ar, a taxa de fluxo de massa do ar foi definida como 1490 Kg/h. Entretanto, para este caso a quantidade de energia disponível para a fusão de alumínio era significativamente menor do que para o caso O_2 , sendo que forneceu uma transferência de calor sobre a superfície de alumínio de 620kW, e somente 11 toneladas do alumínio derretido poderiam ser obtidas para o um período de uma hora. Para derreter 16 toneladas, a duração do processo deve ser realizada menos de 1 hora e 25 minutos. Isto é provavelmente devido ao fato que uma quantidade adicional de energia é necessária para aquecer o nitrogênio atual no ar, e também devido à grande quantidade de nitrogênio, a uma mistura pobre do oxidante e combustível é obtido gerando uma combustão menos eficiente.

Para ser capaz de comparar o mesmo processo, um terceiro caso foi analisado, de modo que a mesma quantidade de alumínio derretido em uma hora pudesse ser obtida. A quantidade de combustível foi aumentada de modo que um fluxo do calor igual a 880 kW sobre a superfície de alumínio fosse obtido. A taxa de fluxo de massa do combustível foi ajustada como 148 kg/h (que corresponde a uma chama do gás natural de 6,6 MW), e a taxa de fluxo de massa do ar foi ajustada como 2258 Kg/h.

No momento em que o oxidante foi injetado nas três aberturas, a quantidade total da taxa de fluxo de massa do oxidante foi dividida igualmente em cada entrada.

Devido às limitações do espaço e sendo o comportamento qualitativo de ambas os casos do ar similar, somente a comparação entre este último caso e o caso do oxigênio será apresentada.

Distribuição da temperatura e do fluxo de calor

As Figuras 3 até 8, apresentam uma comparação da distribuição do fluxo da temperatura e do calor dentro do forno, com os dois tipos de oxidante. A finalidade da comparação é identificar a influência do tipo de oxidante na forma da chama, na distribuição da temperatura e na distribuição do fluxo do calor sobre a carga de alumínio.

Como já mencionado, os casos selecionados para serem apresentados produziram a mesma taxa de transferência total de calor de 880 kW sobre a superfície de alumínio. Figura 3 mostra um isosuperfície de 1600K, enquanto a Fig. 4 ilustra a distribuição da temperatura passando pelo

plano y-z dos queimadores ($x=0,8$ m). As distribuições da temperatura na parede refratária são mostradas na Fig. 5. Para analisar melhor a influência dos oxidantes, Figs. 6 e 7 mostram perfis de temperatura ao longo das linhas selecionadas dentro do forno.

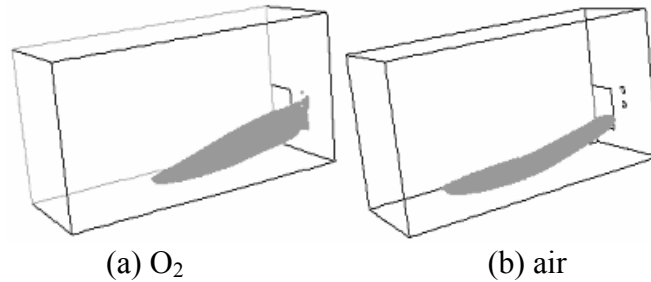


Fig. 3: Isosuperfícies de temperatura, $T=1600$ K.

A forma da chama para ambos os oxidantes pode ser examinada nas isosuperfícies de 1600K (Fig. 3). Ambas as chamas seguem o sentido dos jatos da entrada, longe das paredes refratárias e para baixo em direção a superfície da carga. A combustão começa perto da entrada, onde os valores elevados são obtidos, e então o nível de temperatura cai rapidamente abaixo de 1600K. As Figuras 3a, 4a e 5a correspondem ao caso 1 (O_2) onde uma região mais curta e mais larga da chama pode ser vista, assim como temperaturas mais altas. A temperatura máxima dentro do forno é 3840 K. Os resultados do ar são apresentados nas Figs. 3b, 4b e 5b, onde pode observar que a chama está muito mais longa e as temperaturas são mais baixas. Para este caso a temperatura máxima dentro do forno é 1950K.

Enquanto a chama do ar se estende através do forno, a chama do O_2 é mais intensa e concentrada na primeira metade do domínio. Isto conduz a uma distribuição da temperatura menos uniforme nas paredes refratárias (mostradas na Fig. 5) e poderia também comprometer a uniformidade do fluxo do calor na superfície de alumínio (Fig.8). Na figura 5, a influência da chama na parede refratária é vista claramente para o caso O_2 , pelos pontos quentes na parede lateral (1446K). Estes pontos podem danificar a parede refratária, aumentando o custo do projeto. Embora os pontos quentes sejam observados para o caso O_2 , a temperatura média em todas as paredes refratárias é similar, é ao redor 1360K. Também, sendo a flama mais curta, a temperatura máxima da parede é observada no plano frontal (1708K). A distribuição da temperatura da parede para o caso do ar (Fig.5b) está mais uniforme e a uma temperatura média da parede é 1407K. As paredes são mais frias próximas a superfície do alumínio e quentes na parede posterior, alcançando um máximo de 1440 K.

Examinando a distribuição da temperatura em um plano que passe através dos injetores ($x = 0,80$ m), Fig. 4, pode-se ver para ambos os casos, o jato frio do oxigênio sobre o jato do gás natural, perto da região da entrada. Devido à combustão, um aumento substancial da temperatura pode ser observado, especialmente para o caso O_2 . O nível de temperatura dentro do forno é aproximadamente o mesmo para ambos os oxidantes (1400 K). Entretanto, deve-se recordar que para o caso 2, uma quantidade maior de gás natural foi injetada para alcançar o mesmo nível do fluxo do calor na superfície do alumínio.

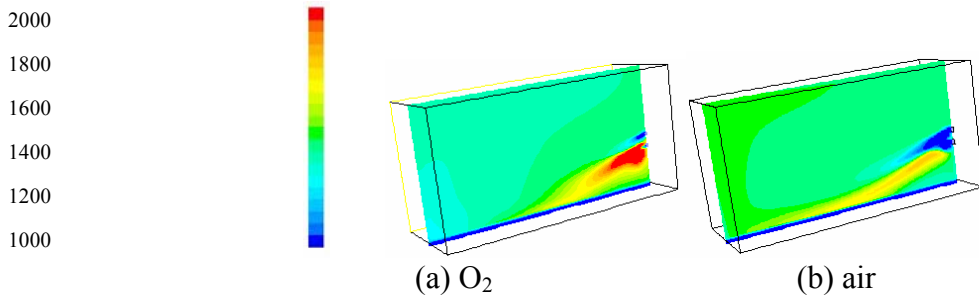


Fig. 4: Distribuição da Temperatura (K). Plano y-z ($x=0.8$ m)

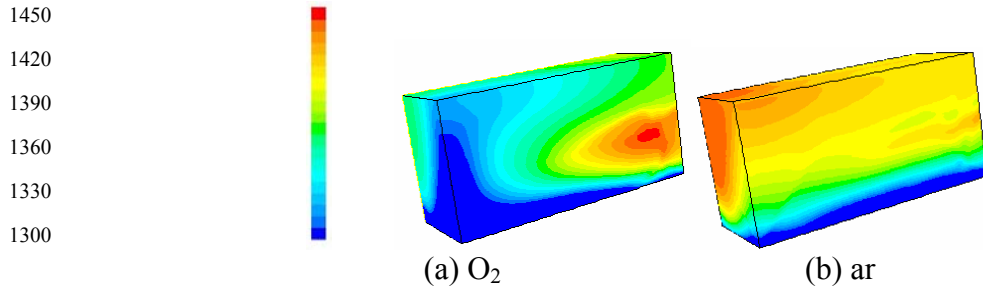
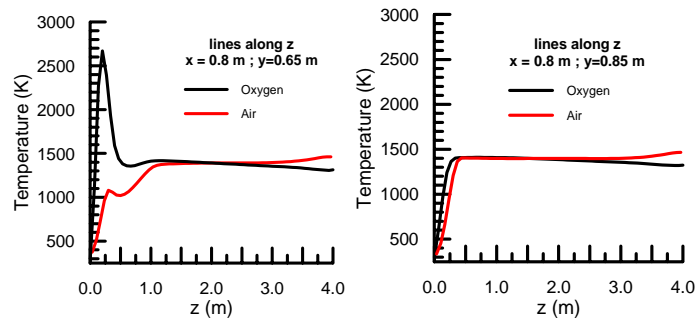


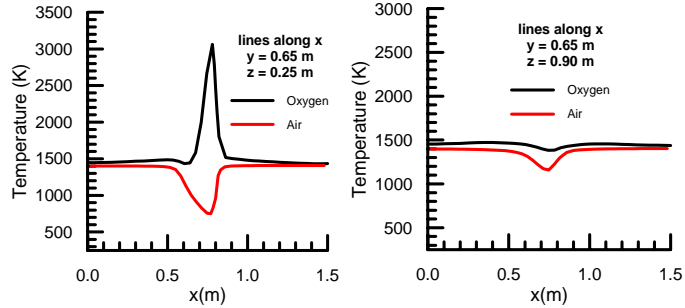
Fig. 5: Distribuição da temperatura na parede do refratário.

Figura 6 mostra o perfil de temperatura ao longo da coordenada z para duas linhas dentro do forno. A primeira linha (Fig.6a) passa através do centro do queimador ($x = 0,80$ m e $y = 0,65$ m), e a outra (Fig. 6b) passa através do centro do injetor do oxidante ($x = 0,80$ m e $y = 0,85$ m). Pode-se ver que, como já mencionado, os níveis de temperatura dentro do forno são em torno de 1400K para ambos oxidantes. Fig. 7 apresenta o perfil de temperatura ao longo do eixo x , na altura do queimador, em duas posições de z perto da entrada. Há uma pequena depressão no nível de temperatura em $y=0,65$ m e em $z=0,90$ m (Fig. 7b), para ambos os casos. Isto é devido ao fato de que as entradas de combustível/oxigênio estão frias, e somente depois que ambas as espécies estão em contato, o processo da combustão começa. Sendo a existência somente de oxigênio na entrada mais baixa, reduz a temperatura da mistura mais quente que chega do queimador superior. Devido à quantidade elevada de nitrogênio no caminho do ar, é mais difícil para o oxigênio misturar com o gás natural, conseqüentemente, a reação começa mais distante da entrada e temperaturas mais baixas podem ser vistas em $z = 0,25$ m. O pico da temperatura para o caso O2 indica que a reação já acontecia nessa posição.



(a) $x = 0.80$ m; $y = 0.65$ m (b) $x = 0.80$ m; $y = 0.85$ m

Fig. 6: Perfil de temperatura ao longo do eixo z dentro do forno.



(a) $y = 0.65$ m; $z = 0.25$ m (b) $y = 0.65$ m; $z = 0.90$ m

Fig. 7: Perfil de temperatura ao longo do eixo x dentro do forno.

O fluxo do calor por radiação na superfície de alumínio é apresentado na Fig. 8. Devido à alta temperatura da chama, o fluxo de calor por radiação é dominante. Podem-se observar elevados valores do fluxo do calor da radiação sob a chama para ambos os casos; entretanto, sendo a chama de O2 muito mais concentrada, uma pequena região de elevado fluxo de calor pode ser vista perto da entrada.

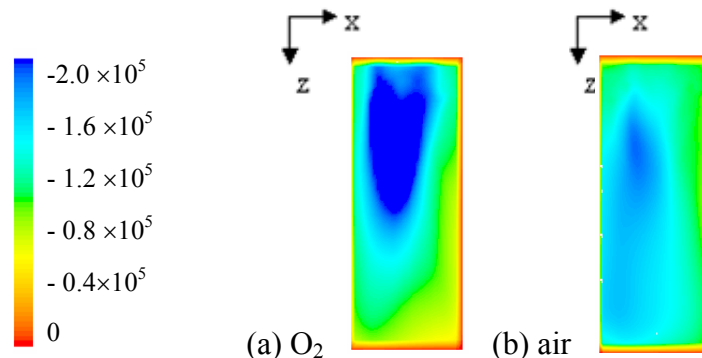


Fig. 8: Distribuição do fluxo de calor por radiação (W/m^2)

Distribuição das espécies

O metano (CH_4) é o componente mais abundante no gás natural, representando 77% de sua composição mássica. Conseqüentemente, a análise desta espécie dá uma boa idéia de como o combustível é consumido dentro do forno. O combustível reage com o oxigênio para dar forma ao produto. As distribuições dos reagentes dão também uma idéia de como a chama se distribui ao longo do forno. A região da chama é compreendida para ser a região onde ocorre o consumo mais elevado do combustível, seguido por um grande aumento da liberação de calor e da temperatura. A comparação das distribuições do combustível e do oxigênio para ambos os casos é mostrada na Fig. 9, onde as isosuperfícies que correspondem a 1% da fração de massa de CH_4 (vermelho) e da fração de massa de 5% do O_2 (azul) são apresentadas. As concentrações de massa de ambas as espécies são mais elevadas dentro das respectivas isosuperfícies. Pode-se ver a isosuperfície do O_2 conectado com o queimador superior e inferior. O CH_4 é injetado somente no queimador inferior; conseqüentemente a concentração CH_4 é elevada, abaixo do jato de O_2 . Pode-se observar que a reação ocorre perto da entrada, conduzindo a baixos valores da espécie reagindo nesta região. Pode-se ver claramente que devido a uma quantidade elevada de nitrogênio atual no ar, a distribuição O_2 para este caso está menos concentrada, conduzindo a um

isoperfície de O₂ menor de 5%. Pode-se notar um pior contato do oxigênio com o gás natural, devido à presença do nitrogênio.

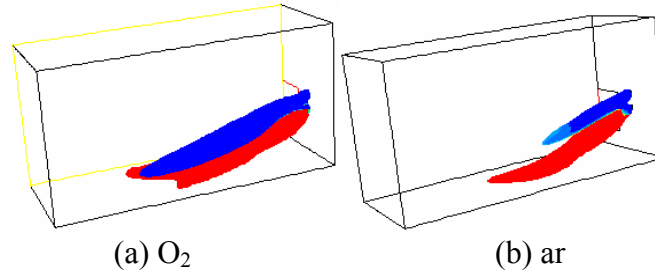


Fig. 9: Isoperfícies de 1% CH₄ (vermelho) e 5% O₂ (azul)

A reação do gás natural com oxigênio está em duas etapas. Inicialmente o monóxido de carbono e água são criados, e então o CO reage com o oxigênio que cria o dióxido de carbono.

A distribuição do monóxido de carbono dentro do forno pode ser vista na Fig. 10, no plano que passa através dos injetores ($x = 0,80$ m). Os resultados para os casos do ar e do O₂ são similares. Pode-se ver que o CO é praticamente todo consumido gerando o CO₂ para ambos os oxidantes. Como esperado, a região de maior concentração do CO coincide a região da chama, sendo mais longa para o caso do ar. A segunda reação da etapa ocorre na parte mais inferior da chama.

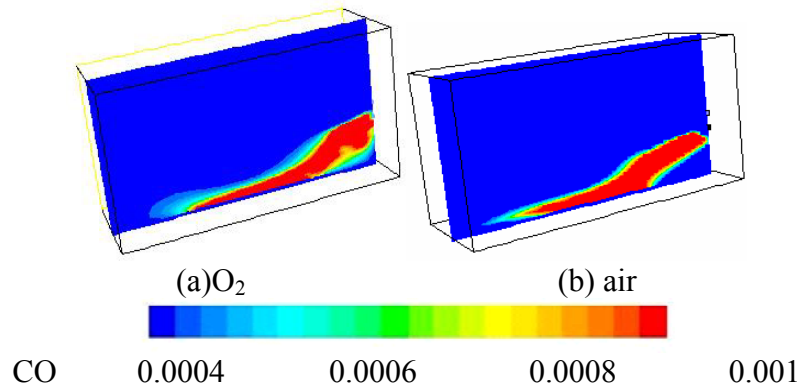


Fig. 10: Fração mássica de CO no plano y-z ($x=0.80$ m)

A Figura 11 mostra a distribuição do CO₂ em diversos planos x-y ao longo da coordenada axial de z, para ambos os oxidantes. Pode ser visto valor mais baixo na região da chama, sendo que o produto continua sendo formado. Também pode ser visto uma quantidade menor de CO₂ para o caso do ar, que é um aspecto positivo relacionado com a seleção deste oxidante. Para melhor ilustrar a quantidade de CO₂ que sai do forno, sua distribuição na chaminé é apresentada na Fig. 12. Para ambos os casos, a concentração do CO₂ na chaminé é aproximadamente uniforme. O caso do ar tem uma concentração de fração mássica igual a 27% da concentração do caso O₂.

Embora a quantidade de CO₂ seja menor para o caso do ar, um segundo tipo de poluente é formado, que é o NO_x. Sua distribuição da fração da molar é ilustrada na Fig.13 no plano que passa através dos injetores ($x = 0,80$ m) e na Fig. 14 na chaminé

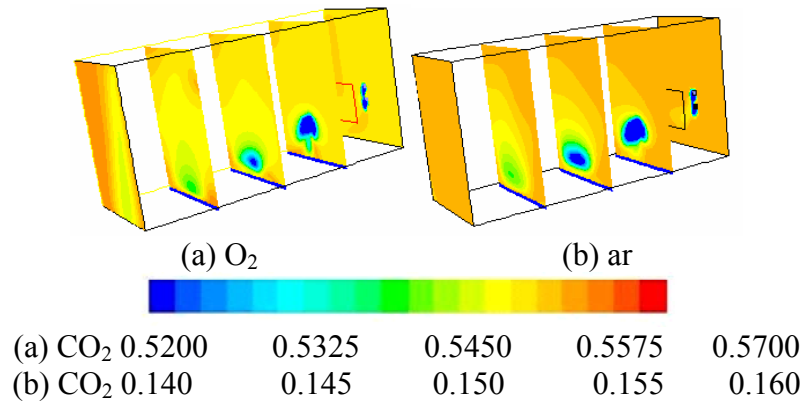


Fig. 11: Fração mássica de CO₂ dentro do forno. Planos x-y. z=0m, 1m, 2m, 3m e 4m.

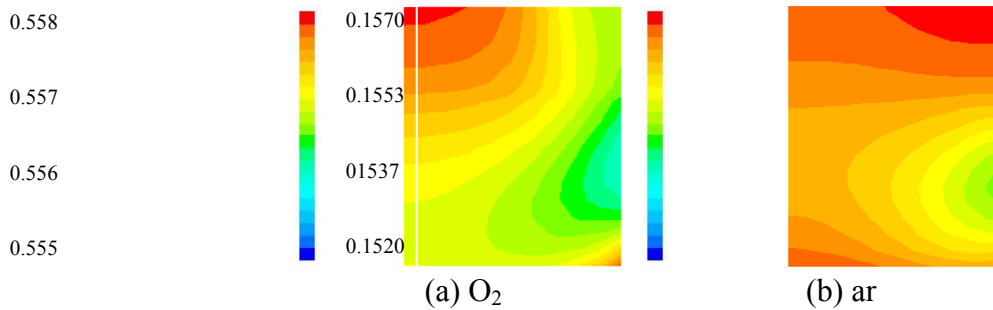


Fig. 12: Fração mássica de CO₂ na chaminé.

Pode-se ver que, como esperado, a distribuição de NO_x segue o mesmo perfil de toda espécie restante em x=0,8m. Sua concentração é aproximadamente uniforme na chaminé, e seu valor médio é igual a 4,25 ppm. A presença de NO_x é o pior inconveniente de se empregar o ar em vez do oxigênio puro.

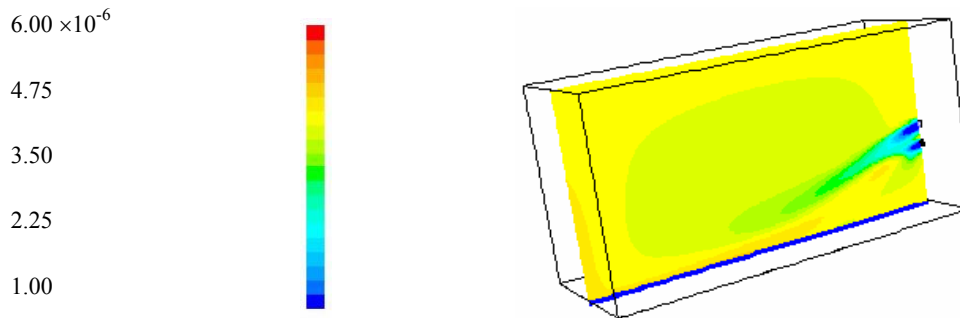


Fig. 13: Fração molar de NO_x no plano y-z, x=0.8 m.

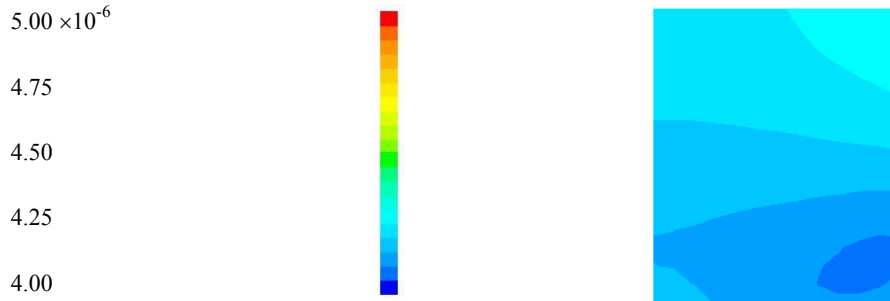


Fig. 14: Fração molar de NOx na chaminé

A Figura 15 mostra a distribuição da água sobre a superfície de alumínio. A concentração elevada de água não é desejável porque uma camada do óxido de alumínio pode ser formada na reação da água com a superfície de alumínio, que aumenta a resistência térmica e compromete a qualidade do produto. É interessante observar que a menor concentração da água está sob a flama. Note, entretanto, que a distribuição da água é quase uniforme em ambos os casos. Como a distribuição do CO₂, o caso do ar produziu uma menor quantidade de água, que é também um aspecto desejável, para evitar a oxidação do alumínio.

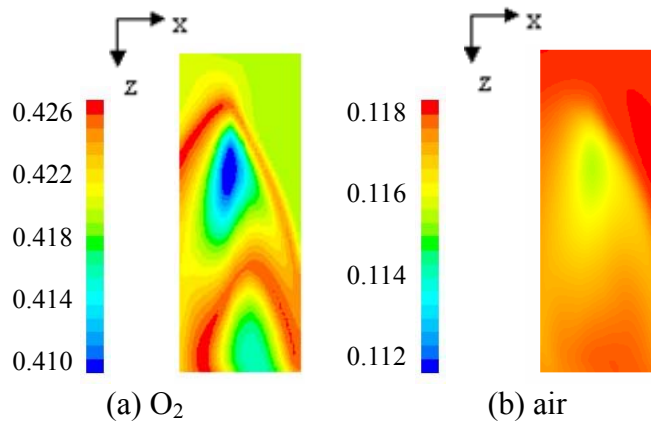


Fig. 15: Distribuição da fração de água na superfície do alumínio.

Conclusão

A simulação numérica do processo dentro do forno de derretimento de alumínio provou ser uma ferramenta útil, que pudesse contribuir para melhorar diversos aspectos de interesse industrial, por exemplo, redução de custos de material na manutenção das paredes do refratário, no aumento da eficiência do processo da fusão, na garantia da qualidade do produto pela investigação da deposição de água na superfície de alumínio, em posicionar melhor os injetores do queimador e do oxigênio, etc.

A simulação numérica permite também a investigação fácil da influência de diversas variáveis no processo; entretanto, os modelos matemáticos que serão usados devem ser escolhidos com cuidado para maximizar a confiabilidade nos resultados, não levando a situação física fora da realidade que representa o fenômeno.

A escolha do tipo de oxidante usado como a fonte de energia para a fusão de alumínio pode ser crucial para conseguir melhor eficiência no processo. Viu-se que a opção para o oxigênio puro

ou o ar como o oxidante pode significativamente alterar os aspectos da combustão dentro do forno, tal como a formação de chamas demasiadamente longas ou intensas, conduzindo aos pontos quentes nas paredes refratárias e a uma distribuição não uniforme do fluxo de calor na carga de alumínio.

Embora uma comparação numérica direta com resultados experimentais não fosse executada devido à falta de dados experimentais, os modelos de turbulência e de combustão empregados aqui foram usados para prever as características do fluxo no forno industrial de fusão de alumínio [6] com resultados razoáveis. O campo de fluxo foi obtido com o mesmo modelo em um forno cilíndrico [20] e uma semelhança com dados experimentais foi obtida.

A análise atual mostrou que a seleção do ar como o oxidante tem diversas vantagens em relação ao uso do oxigênio puro. O nível de temperatura é menor, assim protegendo as paredes do refratário, a concentração menor dos produtos foi obtida na chaminé, e menor concentração de água foi encontrada na superfície de alumínio. Embora uma chama mais longa fosse obtida com o ar, não apresentou um impacto significativo na temperatura das paredes do refratário. Entretanto, a fim de produzir a mesma quantidade de alumínio fundido, uma quantidade maior de ar teve que ser especificada, reduzindo a vantagem de empregar um oxidante mais barato. Observou-se também, a formação insignificante de NO_x.

Referências

- [1] Hill, SC, and SMOOT, LD, 2000, “Modeling of nitrogen oxides formation and destruction in combustion systems”, *Progress in Energy and Combustion Science*, v 26, pp 417-558
- [2] YANG, WH, and BLASIAK, W, 2005, “Numerical simulation of properties of a LPG flame with high-temperature air”, *International Journal of Thermal Sciences*, v 44, pp 973-985.
- [3] FRASSODALTI, A, FRIGERIO, S, COLOMBO, E, INZOLI, F, and FARAVELLI, T, 2005, “Determination of NO_x emissions from strong swirling confined flames with an integrated CFD-based procedure”, *Chemical Engineering Science*, v 60, pp 2851-2869.
- [4] TECFLAM, 2006, German TECFLAM cooperation, page: www.tu-darmstadt.de/fb/mb/ekt/tecflam.
- [5] WANG, L, HAWORTH, DC, TURNS, SR, and MODESTO, MF, 2005, “Interactions among soot, thermal radiation, and NO_x emissions in oxygen-enriched turbulent non-premixed flames: a computational fluid dynamics modeling study”, *Combustion and Flame*, v 141, pp 170-179.
- [6] NIECKELE, A.O., NACCACHE, M. F., GOMES, M. S. P., 2004, “Numerical Simulation of a Three Dimensional Aluminum Melting Furnace”, *Journal of Energy Resources Technology*, ASME, vol. 126, pp.72-81.
- [7] NIECKELE, A.O.; NACCACHE, M. F.; GOMES, M. S. P. and KOBAYASHI, W., 1999, “The influence of oxygen injection configuration in the performance of an aluminum melting furnace,” *Proceedings of 1999 ASME-IMECE, USA, Heat Transfer Division*, **2**, pp. 405-412..
- [8] BREWSTER, B.S.; WEBB, B.W.; MCQUAY; M.Q., D'AGOSTINI, M. and BAUKAL, C.E., 2001, “Combustion measurements and modelling in an oxygen-enriched aluminium-recycling furnace,” *Journal of the Institute of Energy*, **74**, pp. 11-17.

- [9] MUKHOPADHYAY, A.; Puri, I.K.; ZELEPOUGA, S. and RUE, D.M., 2001, "Numerical simulation of methane-air nozzle burners for aluminum remelt furnaces," *Proceedings of 2001 ASME-IMECE*, USA, CD-ROM, HTD-24234.
- [10] NIECKELE, A.O.; NACCACHE, M. F.; GOMES, M. S.. P.; CARNEIRO, J.N.E.; SERFATY, R., 2002, "Numerical simulation of natural gas combustion using a one step and a two step reaction", *Proceedings of 2002 ASME-IMECE*, November 11-16, New Orleans, LO, USA.
- [11] Fluent User's Guide, v. 6.2, 2006, Fluent Inc., New Hampshire.
- [12] KUO, K.K., 1986. Principles of Combustion, John Wiley & Sons, New York.
- [13] LAUNDER, B.E. and SPALDING, D.B., 1974. "The Numerical Computation of Turbulent Flows", *Computer Methods in App. Mech. and Engineering*, 3, p. 269-289.
- [14] PATANKAR, S.V. and SPALDING, D.B., 1967. Heat and Mass transfer in Boundary Layers, Morgan-Grampian, London.
- [15] SMITH, T.F., SHEN, Z.F., and FRIEDMAN, J.N., 1982. "Evaluation of Coefficients for the Weighted Sum of Gray Gases Model", *Transactions of the ASME - Journal of Heat Transfer*, v. 104, p. 602-608.
- [16] TOMECZEK, J. and GRADÓN, B., 1997. "The Rate of Nitric Oxide Formation in Hydrocarbon Flames", Fourth International Conference on Technologies and Combustion for a Clean Environment, Lisbon, Portugal.
- [17] HANSON, R. K. and SALIMIAN, S. 1984, "Survey of Rate Constants in H/N/O Systems". In W. C. Gardiner, editor, *Combustion Chemistry*, page 361.
- [18] FENIMORE, C.P., 1971, "Formation of nitric oxide in premixed hydrocarbon flames", in 13th Int. Symp. on Combustion, p. 373, The Combustion Institute.
- [19] SOETE, G.G., 1975, "Overall reaction rates of NO and N₂ formation from fuel nitrogen", 15th Symp. on Combustion, p. 1093-1102, The Combustion Institute.
- [20] NIECKELE, A.O.; NACCACHE, M.F., GOMES, M.S.P.; Carneiro, J.N.E.; Serfaty, R., 2001, "Models evaluations of combustion processes in a cylindrical furnace", *Proceedings of 2001 ASME IMECE*, 2001, New York, NY, CD-ROM