

4. Metodologia e considerações básicas

No contexto do presente estudo, a simulação da combustão do gás natural tem por objetivo permitir o avanço da compreensão do comportamento deste combustível injetado pelas ventaneiras de um alto forno siderúrgico. A partir de um estudo paramétrico é possível explorar o potencial deste combustível, no sentido de obter temperaturas de chama requeridas ao processo, altas concentrações dos gases redutores de óxidos de ferro: CO e H₂ e, além disso, evitar o desperdício de combustível. Prever os resultados referentes à temperatura de chama adiabática e produção dos gases redutores de óxidos de ferro provenientes da combustão do gás natural em condições típicas de um alto forno é de fundamental importância para otimização do processo de produção de ferro gusa líquido.

A oxidação de um combustível é conseguida através de um número substancial de reações elementares que associadas aos parâmetros cinéticos correspondentes definem um mecanismo cinético detalhado. Dentre os mecanismos cinéticos detalhados para a combustão do gás natural o GRI-Mech merece confiabilidade, pois apresentou a representação precisa da maioria dos resultados experimentais. O presente trabalho utilizou esse mecanismo cinético para aquisição dos resultados, levando em consideração essa característica de representatividade.

Neste capítulo serão brevemente descritos o procedimento para aquisição dos resultados referentes a simulação da combustão do gás natural. Inicialmente são apresentadas as informações relacionadas ao software CHEMKIN e ao mecanismo cinético GRI-Mech. Finalmente são apresentadas as variáveis de projeto que permitiram realizar o estudo paramétrico.

4.1

Software aplicado para simulação da combustão

O CHEMKIN é um pacote de software poderoso para resolver problemas complexos envolvendo cinética química. As simulações provenientes do CHEMKIN são amplamente utilizadas para a otimização da combustão e de outros sistemas de processamento químico. A partir desse pacote de software é possível explorar rapidamente o impacto das variáveis de projeto sobre o desempenho do processo, emissão de gases e extinção de chama, usando modelos precisos de cinética química, de modo a obter resultados úteis para a tomada de decisão.

O CHEMKIN original foi publicado em 1980, ao longo de quase duas décadas correções e melhorias foram implementadas. A versão atual e mais completa é o CHEMKIN-PRO, que é de 2 a 5 vezes mais rápido que a versão anterior. Desde 1997, CHEMKIN foi licenciado para Reaction Design Inc. A empresa sediada em San Diego desenvolve e comercializa software para simulação de uma variedade de processos químicos. Grandes variedades de modelos cinéticos precisos tornam a ferramenta de simulação cinética mais confiável com relação a dúvidas conceituais de projeto (Reaction Design, 2014). O GRI-Mech foi o mecanismo cinético detalhado aplicado para simulação da combustão do gás natural.

4.2

Mecanismo de reação aplicado no software CHEMKIN

Durante os anos 1990, o Instituto de Pesquisa sobre Gás (*GRI-Gas Research Institute*), em parceria com o departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de California, em Berkeley, conduziu um extenso projeto de pesquisa focado na elaboração de um mecanismo que oferecesse a melhor descrição da queima de gás natural. O trabalho desenvolvido resultou em três versões do mesmo mecanismo de reação, sucessivamente aperfeiçoado: GRI-Mech 1.1, GRI-Mech 2.11 e GRI-Mech 3.0 (Curran, 2008).

A versão mais completa do mecanismo de reação denominada GRI-Mech 3.0, é composto por um conjunto de 325 reações elementares em fase gasosa, envolvendo 53 espécies químicas. Este mecanismo baseia-se num conjunto de

reações elementares, em que os valores atribuídos para os parâmetros de velocidade de reação são fornecidos a partir da associação de dados teóricos, experimentais e numéricos. O mecanismo é ajustado para oferecer a melhor descrição da combustão de metano e gás natural com ar para temperaturas entre 1000 e 2500K. As reações presentes no mecanismo incluem as etapas consideradas importantes para a ignição e propagação de chamas de gás natural, incluindo a formação e redução de NO, utilizando parâmetros de taxa reação baseadas nos mais recentes trabalhos em teoria de reações elementares publicados.

O GRI- Mech 3.0 apresenta muitas vantagens, dentre as quais a mais relevante é a representação correta da maioria dos resultados experimentais disponíveis para a combustão do gás natural (Smith et al., 1999).

4.3 Reator Perfeitamente Agitado

A primeira etapa do presente estudo consistiu na aplicação de um modelo de reator PSR, utilizando o software CHEMKIN – PRO. Esse tipo de reator foi escolhido porque segundo (Turns, 2000) reatores experimentais que empregam jatos de alta velocidade de entrada de ar se aproximam do ideal de mistura perfeita de um reator PSR e têm sido usados para estudar muitos aspectos da combustão como estabilização da chama e a formação de gases provenientes da combustão.

O reator perfeitamente agitado PSR (*perfectly stirred reactor*), ou também CSTR (*contínuos stirred tank reactor*) é o modelo idealizado de reator químico. Esse modelo idealizado se mostrou útil para descrever experiências laboratoriais e, muitas vezes pode ser utilizado na modelação de situações práticas (Kee, 2013)

Nesse modelo de reator assume-se que reagentes e produtos estão uniformemente distribuídos em todo o volume, graças à elevadas taxas de mistura por difusão e às flutuações turbulentas (Fogler, 2009). Reatores experimentais que empregam jatos de alta velocidade de entrada de ar se aproximam deste modelo idealizado e têm sido usados para estudar muitos aspectos da combustão, tais como a estabilização da chama e a formação de NO_x (Turns, 2000). A figura 13 apresenta o conceito do reator perfeitamente agitado.

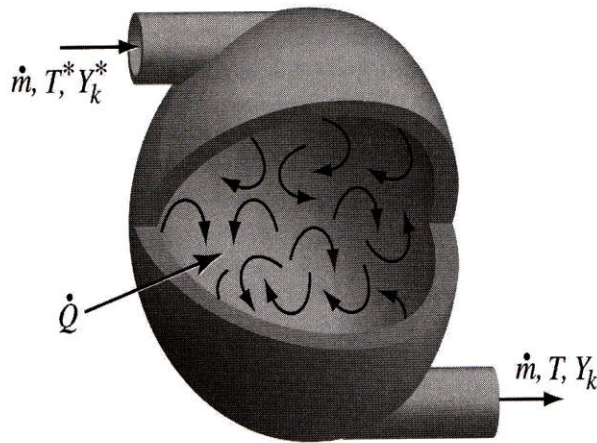


Figura 13 - Representação esquemática do reator perfeitamente misturado (FOGLER, 2009)

Os gases entram no reator com um de fluxo de massa \dot{m} , a uma temperatura T^* e fração de massa Y_k^* .

Por ser normalmente operado em estado estacionário e considerado estar perfeitamente misturado, conseqüentemente, a temperatura, a concentração ou a velocidade de reação dentro do PSR não dependem do tempo ou da posição. Ou seja, cada variável é a mesma em cada ponto dentro do reator. Uma vez que a temperatura e a concentração são idênticas em qualquer ponto no interior do tanque de reação, elas são as mesmas na saída como em qualquer outro ponto do tanque. Assim, a temperatura e a concentração na corrente de saída são modeladas como sendo iguais àquelas no interior do reator (Fogler, 2009).

Na formulação matemática de um PSR em regime permanente, define-se um volume de controle rígido onde os reagentes ingressam e são instantaneamente misturados ao conteúdo do reator enquanto a mistura de produtos e reagentes estabelecida no interior do equipamento escoia continuamente para fora do reator (Fogler, 2009).

4.4 Variáveis de projeto

Os dados de entrada para aquisição dos resultados foram provenientes de uma usina siderúrgica que injetou gás natural nas ventaneiras do alto forno, com o

objetivo de reduzir o consumo de coque, reduzir as emissões de CO₂, aumentar a produtividade, proporcionar elevadas temperaturas no sentido de fundir a carga metálica e produzir ferro gusa líquido (D'Abreu, 2012).

Para obtenção dos resultados referentes a simulação da combustão do gás natural a partir do software CHEMKIN é necessário ter disponível um mecanismo cinético, nesse caso específico foi utilizado o GRI-Mech, os dados de entrada que são as variáveis de projeto as quais permitiram realizar o estudo paramétrico. A vazão volumétrica, temperatura e a composição do combustível e do comburente são as variáveis do projeto aplicadas no software.

Com relação a temperatura do combustível, este foi injetado a temperatura ambiente, ou seja, 25°C, enquanto o ar de combustão foi pré aquecido, para realização do estudo paramétrico foi utilizado duas temperaturas: 1020°C e 1350°C, que correspondem a temperatura média de aquecimento do ar de combustão do alto forno da siderúrgica em questão e a temperatura máxima alcançada por um regenerador do tipo Cowper (D'Abreu, 2009; Anderson et al, 1961).

No que diz respeito a composição do combustível e do comburente a tabela 2 apresenta a composição do combustível empregada para aquisição dos resultados, enquanto que a tabela 3 apresenta a composição do comburente, com três percentuais de enriquecimento de oxigênio: 0,44, 3,21, 4,69, que representam o percentual de enriquecimento mínimo, médio e máximo da siderúrgica em questão (Anderson et al, 1961).

Tabela 2 – Composição do gás natural

COMPOSIÇÃO TÍPICA DO GÁS NATURAL	
Componente	(%) Volume
METANO	88,42
ETANO	8,81
PROPANO	0,55
NITROGÊNIO	1,62
DIÓXIDO DE CARBONO	0,6

Tabela 3 – Composição do ar de combustão de acordo com a vazão e % Enriquecimento de O₂

Ar (Nm ³ /seg)	%O ₂	O ₂ (Nm ³ /seg)	N ₂ (Nm ³ /seg)	H ₂ O (Nm ³ /seg)
28,9	0,44	5,99	22,04	0,89
39,0	0,44	8,07	29,70	1,20
48,0	0,44	9,94	36,59	1,48
58,0	0,44	12,01	44,21	1,79
72,5	0,44	15	55,22	2,23
83,3	0,44	17,25	63,51	2,57
95,0	0,44	19,66	72,39	2,93
106,6	0,44	22,06	81,21	3,28
28,9	3,21	6,60	21,45	0,87
39,0	3,21	8,90	28,91	1,17
48,0	3,21	10,96	35,6	1,44
58,0	3,21	13,24	43,02	1,74
72,5	3,21	16,54	53,74	2,17
83,3	3,21	19,02	61,81	2,5
95,0	3,21	21,68	70,45	2,85
106,6	3,21	24,32	79,03	3,19
28,9	4,69	6,92	21,15	0,85
39,0	4,69	9,32	28,5	1,15
48,0	4,69	11,48	35,1	1,42
58,0	4,69	13,87	42,41	1,71
72,5	4,69	17,33	52,98	2,14
83,3	4,69	19,93	60,94	2,46
95,0	4,69	22,72	69,46	2,81
106,6	4,69	25,49	77,92	3,15

No que diz respeito à vazão volumétrica do comburente e do combustível, foi utilizado dados reais da siderúrgica em análise no software CHEMKIN para obtenção do resultado referente a simulação da combustão do gás natural. A tabela 4 apresenta os valores mínimos, médios e máximos da vazão do comburente e do combustível, para realização do estudo paramétrico.

Tabela 4 – vazão volumétrica do comburente e do combustível

	Vazão ar (Nm ³ /seg)	Vazão GN (Nm ³ /seg)
Mínima	28,92	0,18
Média	66,44	2,00
Máxima	106,55	3,92

A disponibilidade de informações como vazão volumétrica, temperatura, e composição do combustível e do comburente provenientes de dados reais da siderúrgica analisada foi de fundamental importância para realização do presente trabalho, pois permitiram obter informações úteis para a tomada de decisão, no sentido de obter temperatura de chama requerida ao processo, maximizar a produção dos gases redutores de óxidos de ferro e evitar o desperdício de combustível (D'Abreu, 2012; Anderson et al, 1961).