

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
Escola de Engenharia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e
de Materiais – PPGE3M

DESENVOLVIMENTO DE UMA METODOLOGIA
NUMÉRICA PARA ESTIMATIVA DE ESPESSURA DE
LEDGE NA PRODUÇÃO DE ALUMÍNIO PRIMÁRIO

Dissertação para Obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Guilherme Leal Schneider

Porto Alegre, Fevereiro 2012

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
Escola de Engenharia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e
de Materiais – PPGE3M

DESENVOLVIMENTO DE UMA METODOLOGIA
NUMÉRICA PARA ESTIMATIVA DE ESPESSURA DE
LEDGE NA PRODUÇÃO DE ALUMÍNIO PRIMÁRIO

Guilherme Leal Schneider

Engenheiro Químico

Trabalho realizado no Departamento de Metalurgia da Escola de Engenharia da UFRGS, dentro do Programa de Pós - Graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e de Materiais – PPGE3M, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Engenharia.

Área de Concentração: Metalurgia Mineral e Extrativa

Porto Alegre, Fevereiro 2012

Esta dissertação foi julgada adequada para obtenção do título Mestre em Engenharia, área de concentração Metalurgia Mineral e Extrativa e aprovada na sua forma final, pelo Orientador e pela Banca Examinadora do Curso de Pós-Graduação.

Orientador: Prof. Dr. Antônio Cezar Faria Vilela

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Wagner Bielefeldt (PPGEM3M/DEMET)

Dr. Leonardo Barboza Trindade (STE)

Prof. Dr. Nestor Cezar Heck (PPGE3M/DEMET)

Prof. Telmo Roberto Strohaecker
Coordenador do PPGE3M/UFRGS

Dedico este trabalho ao meu pai João Carlos, a minha mãe Marluce, minha Dinda Suzana, meu irmão Gabriel e a todas as pessoas que me auxiliam diariamente e tornaram possível a conclusão do mestrado.

Agradecimentos

À todas as pessoas que colaboraram de forma direta e indireta para a realização deste trabalho.

À empresa Caeté Engenharia LTDA por ter me dado condições de trabalho e auxiliado na execução do trabalho.

À Dagoberto Severo e Vanderlei Gusberti pelos momentos de reflexão e idéias para o desenvolvimento do trabalho.

Ao professor Doutor Antônio Cezar Faria Vilela pela orientação ao trabalho e pelo estímulo e confiança no trabalho nos momentos de dificuldade durante a sua execução.

Resumo

Cada vez mais se busca um correto dimensionamento dos materiais refratários e uma correta escolha das variáveis operacionais dos reatores metalúrgicos. No caso da produção de alumínio primário, a competitividade do mercado exige alta vida útil da célula de redução eletrolítica, acompanhada de uma eficiência energética no processo, uma vez que as fontes energéticas estão se tornando cada vez mais escassas. Por isso, a formação e a espessura da camada de banho congelado (também chamada de *ledge*) são muito importantes para estimar e prolongar a vida útil da cuba de redução eletrolítica. A espessura de banho congelado está, intimamente, relacionada com a proteção dos materiais refratários (resultando em aumento de vida útil do reator) e com a resistência térmica do reator metalúrgico para produção de alumínio primário, influenciando a sua eficiência energética. Nesta dissertação estuda-se a simulação termo-elétrica através do uso do pacote comercial Ansys CFX 11. Para isso, é realizada a deformação da malha e a temperatura *Tliquidus* do *ledge* é especificada. Essa deformação acarreta uma alteração da resistência térmica da camada de *ledge*, fato que altera a temperatura das interfaces *ledge*/banho e *ledge*/metal devido ao balanço térmico. Em vista disso, o modelo apresentado tem o objetivo de estimar a espessura do *ledge*, a eficiência energética da Cuba de redução eletrolítica, seu perfil de temperaturas, fluxo de calor e auxiliar na escolha e no projeto de refratários adequados para a cuba de redução eletrolítica utilizada na produção de alumínio primário. A dissertação apresentará o perfil de temperatura na frente de solidificação nas interfaces *ledge*/banho e *ledge*/metal. Também, o presente trabalho mostra o estudo do fluxo de calor através da frente, a espessura de banho congelado, a resistência térmica e a validação do modelo numérica. A metodologia empregada na análise numérica do fenômeno físico estudado foi adequada e conseguiu-se a validação do modelo.

Palavras-chave: *Ledge*, balanço térmico, simulação numérica, alumínio.

Abstract

Increasingly, the aim is a correct sizing of refractory materials and a correct choice of the operating variables of metallurgical reactors. In the case of primary aluminum production, the competitive market requires high life of the electrolytic reduction cell, accompanied by energy efficiency in the process, since the energy sources are becoming increasingly scarce. Therefore, the formation and the layer thickness of bath frozen (also called *ledge*) are very important to estimate and prolong the life of the cell of electrolytic reduction. The thickness of frozen bath is closely related to the protection of refractory materials (resulting in increased life of the reactor) and the thermal resistance of the metal reactor for the production of primary aluminum, influencing its efficiency. On This dissertation is studied the simulation thermo-through the electrical use of commercial package Ansys CFX 11. To Hence it is held the deformation of mesh and temperature *Tliquidus* of the *ledge* is specified. This deformation causes a change in the thermal resistance layer *ledge*, a fact that the temperature changes of the interfaces *ledge* / bath and *ledge* / metal due to thermal balance. As a result, the model aims to estimate the thickness of the ledge, the energy efficiency of electrolytic reduction cell, its temperature profile, heat flow and help in the choice and design of refractories suitable for the electrolytic reduction cell used for the production of primary aluminum. The dissertation shows the temperature profile in front of solidification at the interfaces *ledge* / bath and *ledge* / metal. Also, this paper shows the study of heat flux through the front of solidification, the thickness of the *ledge*, the thermal resistance influence and the validation of numerical model. The methodology used in the numerical analysis of the physical phenomenon studied was adequate and we were able to validate the model.

Keywords: Ledge, thermal balance, numerical simulation, aluminum.

Sumário

Dedicatória.....	iv
Agradecimentos	v
Resumo.....	vi
Abstract	vii
Lista de Figuras.....	x
Lista de símbolos	xii
1 Introdução	1
2 Revisão Bibliográfica.....	4
2.1 Breve histórico e evolução do processo Hall-Hérault.....	4
2.2 Físico-química da eletrólise	11
2.2.1 Características do banho congelado	12
2.2.2 Química da Eletrólise.....	14
2.2.3 Balanço Energético da Cuba de Redução Eletrolítica	15
2.3 Modelos matemáticos	18
2.3.1 Modelo Elétrico	18
2.3.2 Modelo Térmico	19
3 Metodologia.....	21
3.1 Metodologia da Simulação Numérica	21
3.2 Metodologia de Validação.....	28
4 Resultados e discussão	30
4.1 Comparação de diferentes <i>Superheat</i> (SH)	30
4.2 Validação	38

5 Conclusões	40
6 Sugestões para Trabalhos Futuros	42
REFERÊNCIAS.....	43

Lista de Figuras

Figura 1: Linha de cubas de 600A de 1917 (Gjortheim, K. *et al.*, 1988).

Figura 2: Linha de cubas atual de aproximadamente 280 KA (Gjortheim, K. *et al.*, 1988).

Figura 3: Esquema representativo de uma cuba eletrolítica para a produção de alumínio.

Figura 4: Fluxograma genérico do processo de produção de alumínio.

Figura 5: Diagrama de custos de um processo de produção de alumínio através de células de Hall-Héroult (Hume, S.M., 1999).

Figura 6: Modelo térmico de resistências em paralelo segundo László I. K., *et al.*, 2008.

Figura 7: Esquema representativo das regiões de formação do banho congelado.

Figura 8: Diagrama de equilíbrio do eletrólito da cuba de redução eletrolítica.

Figura 9: Esquema representativo dos anodos da cuba de redução eletrolítica juntamente com o corte utilizado na simulação numérica (Gusberti, V., 2007).

Figura 10: Esquema da malha utilizada na simulação numérica (foi realizada a simulação de um corte) em perspectiva isométrica.

Figura 11: Malha em um corte no plano XZ.

Figura 12: Detalhe da malha em um corte ZX.

Figura 13: Esquema representativo da condição de contorno de 3 espécie.

Figura 14: Fluxograma com a Rotina e seqüência dos cálculos realizados.

Figura 15: Perfil de temperatura considerando *Tliquidus* de 954°C, *superheat* 6°C.

Figura 16: Perfil de temperatura considerando *Tliquidus* de 952°C, *superheat* 8°C.

Figura 17: Perfil de temperatura considerando *Tliquidus* de 950°C, *superheat* 10°C.

Figura 18: Variação total da malha na direção X para a *Tliquidus* de 954°C, *superheat* 6°C.

Figura 19: Variação total da malha na direção X para a *Tliquidus* de 952°C, *superheat* 8°C.

Figura 20: Fluxo de calor na interface *ledge/banho* e *ledge/metal* para a *Tliquidus* de 954°C, *superheat* 6°C.

Figura 21: Fluxo de calor na interface *ledge/banho* e *ledge/metal* para a *Tliquidus* de 952°C, *superheat* 8°C.

Figura 22: Fluxo de calor na interface *ledge/banho* e *ledge/metal* para a *Tliquidus* de 950°C, *superheat* 10°C.

Figura 23: Perfil de espessura do *ledge* no plano XZ para diferentes SH.

Figura 24: Gráfico do calor total perdido pela cuba na região da frente de solidificação considerando um anodo típico.

Figura 25: Comparação do perfil de *ledge* obtido no modelo numérico com o perfil médio obtido de dados experimentais de uma cuba de redução eletrolítica real (Aluar AP155).

Lista de símbolos

A = Área perpendicular ao fluxo térmico, [m²];

ACD = Espessura da camada de banho entre o ânodo e metal, distância ânodo-catodo, [mm];

$C_p(T)$ = calor específico do componente i em uma temperatura T , [J mol⁻¹ K⁻¹];

dT = diferencial da temperatura, [K].

E = Consumo energético específico, [kWh/kg de Alumínio];

E_{Eff} = eficiência energética da célula, [%];

δ = Movimento relativo da malha, [m];

Γ_{disp} = Robustez ou rigidez como o movimento relativo é propagado aos nós vizinhos da malha, [-];

σ = Condutividade elétrica, [S m⁻¹];

Φ = Potencial elétrico, [V];

$\Delta\phi$ = Queda de tensão elétrica da cuba, [V];

∇ = representa o gradiente de uma propriedade qualquer;

ΔH_{tot}° = Variação da entalpia total padrão, [J mol⁻¹];;

$\Delta H_{reac,T}^\circ$ = Variação da entalpia da reação de eletrólise, [J mol⁻¹];

$\Delta_f H_{298}^\circ$ = entalpia padrão do componente i a 298 K, [J mol⁻¹];

ΔH_{min} = entalpia mínima, [J mol⁻¹];

H_T° = Entalpia padrão a temperatura T , [J mol⁻¹];

H_{298}° = Entalpia padrão a 298 K, [J mol⁻¹];

H_c = Coeficiente de transferência de calor convectivo, [W m⁻² K⁻¹];

$H_i(T_{i-in})$ = entalpia do componente i na temperatura de entrada T_{i-in} , [J mol⁻¹];

$H_i(T)$ = entalpia da espécie i em uma temperatura T, [J mol⁻¹];

$H_i(T_{i-out})$ = entalpia do componente i na temperatura de entrada T_{i-out} , [J mol⁻¹];

$H_{Al}(T_B)$ = entalpia do alumínio a uma temperatura T_B , [J mol⁻¹];

H_{CO_2} = entalpia de CO₂ a uma temperatura T_B , [J mol⁻¹];

$H_{Al_2O_3}(T_A)$ = entalpia de Al₂O₃ a uma temperatura T_A , [J mol⁻¹];

H_c = entalpia do carbono a uma temperatura T_A , [J mol⁻¹];

\vec{J} = Densidade de corrente elétrica, [A m⁻²];

I = Corrente de operação, [kA];

L_x = Comprimento da cuba, [m];

L_y = Largura da cuba, [m];

k = Condutividade térmica, [W m⁻¹ K⁻¹];

M_{CO_2} = massa molar do CO₂, [g mol⁻¹];

M_{Al} = massa molar de Al, [g mol⁻¹];

$M_{Al_2O_3}$ = massa molar de Al₂O₃, [g mol⁻¹];

M_c = massa molar do carbono, [g mol⁻¹];

m_{i-in} = taxa mássica de entrada do componente i dividido por kg de alumínio, [kg i s⁻¹ kg Al⁻¹];

m_{i-out} = taxa mássica de saída do componente i dividido por kg de alumínio, [kg i s⁻¹ kg Al⁻¹];

Q = Fonte de calor gerada no domínio (por exemplo, efeito Joule), [J];

Q_1 = fluxo de calor nas regiões que exista *ledge* em contato com fase líquida, [$W m^{-2}$];

Q_2 = fluxo de calor nas regiões nas quais não exista *ledge* em contato com fase líquida, [$W m^{-2}$];

Q_{ac} = calor acumulado dentro reator, [J];

Q_{in} = calor ganho pelo volume de controle, [J];

Q_{out} = calor perdido pelo volume de controle, [J]

R_{eqAp} = resistência térmica do reator, [$W m^{-1}$];

R_{n1} = resistência convectiva devido ao fluxo de calor através da frente de solidificação, [$W m^{-1}$];

R_{ledge} = resistência térmica devido a camada de banho congelado, [$W m^{-1}$];

R_w = resistência térmica devido aos materiais refratários, [$W m^{-1}$];

R_2 = resistência térmica total do mecanismo 2, [$W m^{-1}$];

R_{n2} = resistência convectiva e radioativa devido ao fluxo de calor através de superfícies externas, [$W m^{-1}$];

R_{w2} = resistência térmica devido aos materiais refratários, [$W m^{-1}$];

T = Temperatura, [K];

$T_{ambiente}$ = temperatura ambiente fora da Cuba.

T_A = temperatura do ambiente, [K];

T_B = temperatura do banho, [K];

T_{bath} = temperatura do banho, [K];

T_{inf} = Temperatura externa, [K];

$T_L = T_{liquidus}$ do eletrólito, [K];

V_{cell} = voltagem da célula, [V];

η = Eficiência de corrente da redução, [-];

x = direção X, [-];

y = direção Y, [-];

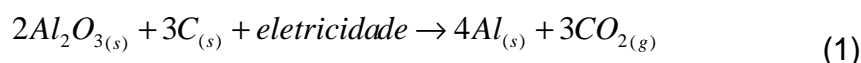
z = direção Z, [-]; w_{Al} = taxa mássica de alumínio, [kg Al s⁻¹];

1 Introdução

O alumínio é um dos metais mais abundantes presentes na crosta terrestre (terceiro em quantidade). Predominantemente, encontra-se na forma de óxidos ou combinado com outros elementos, como é o caso do minério Bauxita (mistura de alumina hidratada, de ferro e de outras impurezas). A extração do alumínio metálico é realizada há séculos, entretanto somente a partir de 1886 descobriu-se um processo economicamente viável de obtenção do alumínio na sua forma metálica. De forma simultânea o americano Charles Martin Hall e o Frances Paul Héroult descobriram um processo de obtenção de alumínio metálico através da redução da alumina. Esse processo tornou-se viável devido ao descobrimento e desenvolvimento da energia elétrica e do processo Bayer de extração da alumina da bauxita, uma vez que o processo é baseado na eletrólise em células eletrolíticas, as quais necessitam de grande quantidade de corrente elétrica.

A alumina é dissolvida e alimentada em uma célula eletrolítica em um eletrólito apropriado a uma temperatura de operação de aproximadamente 960 °C. É necessária uma grande quantidade de corrente elétrica a qual passa através da solução eletrolítica. Essa passagem de corrente elétrica resulta na formação de alumínio metálico através da reação dos íons de alumínio dissolvidos no eletrólito e o bloco anódico. O alumínio metálico é mais pesado do que o eletrólito e fica em contato com a base do catodo fechando o circuito elétrico.

A reação de eletrólise da célula de Hall-Héroult está simplificada representada na reação (1) (Gjortheim, K *et al.*, 1988).



A produção de alumínio em 1990 girou em torno de 20 milhões de toneladas (Fisher, W.K. *et al.*, 1990). Atualmente, ela se aproxima de 34 milhões de toneladas por ano (IAI, 2007), enquanto que no Brasil ela gira em torno de 1,5 milhões de toneladas por ano (ABAL, 2011). Essa produção aumentou muito em relação ao início do século XX cuja produção alcançava aproximadamente 6000 toneladas (Gjortheim, K. *et al.*, 1988). Esse aumento da produção de alumínio deve-se

principalmente a baixa densidade do material a qual é aproximadamente a terça parte do aço. Além disso, é um material de fácil maleabilidade, resistente a corrosão atmosférica, podendo ser utilizado em peças para decoração, e razoável resistência mecânica. O alumínio, também, tem alta condutividade elétrica, fato que permite a sua utilização em linhas de transmissão e transformadores. Esse material devido às propriedades acima citadas encontra espaço na indústria aeronáutica (elementos estruturais em aviões), construção civil (janelas, portas e divisórias), utensílios de cozinhas e embalagens.

Em vista disso, a expansão da produção desse metal e a exigência econômica e energética da atualidade tornam o projeto da Cuba de Redução Eletrolítica fundamental tanto economicamente, quanto energeticamente. O primeiro está relacionado com a competitividade no mercado sendo importante que o projeto da Cuba contemple alta eficiência no processo da eletrólise acompanhada do aumento da vida útil da Cuba. O segundo está relacionado com a eficiência energética da Cuba que deve minimizar todo o desperdício energético através do dimensionamento adequado do projeto do refratário, química do banho e condições de operação.

Neste contexto, surge a necessidade do estudo do *ledge* (eletrólito ou banho congelado devido ao resultado do balanço térmico do reator e variáveis operacionais) o qual é de grande importância no desempenho do processo de produção de alumínio primário. A sua espessura está relacionada com a proteção dos refratários da Cuba Eletrolítica contra a erosão causada pela agitação do metal e com o isolamento térmico do reator metalúrgico utilizado na produção de alumínio primário. Esses dois fatores são muito importantes na atualidade e tornam-se imprescindíveis na escolha dos refratários e no projeto adequado de isolamento térmico das cubas.

Objetivos

Os objetivos gerais deste trabalho são:

- Desenvolver um modelo para calcular o perfil de temperatura na interface banho/*ledge* e metal/*ledge*, a espessura da camada de eletrólito congelado (*ledge*) e a eficiência energética da cuba para três diferentes *Superheat* (diferença entre temperatura *Tliquidus* do *ledge* e temperatura do banho (eletrólito));
- Validação da simulação numérica através de dados experimentais de uma cuba industrial;

Especificamente, deseja-se:

- Determinar, em relação à variação de *Superheat* (SH), mantendo-se a temperatura do banho constante, os respectivos valores:
 - fluxo de calor na interface banho/*ledge* e metal/*ledge*;
 - resistência térmica da camada de *ledge* formada.

2 Revisão Bibliográfica

A revisão bibliográfica encontra-se dividida em três partes, a saber: breve histórico e evolução do processo Hall-Héroult, físico-química da eletrólise e modelos matemáticos.

2.1 Breve histórico e evolução do processo Hall-Héroult

A primeira célula eletrolítica comercial operava com uma corrente elétrica de 600A por célula. Entretanto, nos últimos 110 anos verificou-se um aumento de escala de produção e um incremento gigantesco na corrente elétrica. Atualmente, verificam-se células comerciais operando com 300 KA de corrente (Gjorheim, K *et al.*, 1988). O princípio fundamental do processo continua o mesmo, entretanto o design e a aparência da célula mudaram drasticamente. Essas mudanças incorporaram tecnologia, aumentaram a vida útil da célula, aumentaram a eficiência de corrente do processo, entre outros.

Essa evolução de tecnologia empregada e do design da cuba pode ser visto nas figuras 1 e 2 nas quais se observam uma linha de cuba do início do século passado e uma linha atual respectivamente.



Figura 1: Linha de cubas de 600A de 1917 (Gjorheim, K. *et al.*, 1988).



Figura 2: Linha de cubas atual de aproximadamente 280 KA (Gjortheim, K. *et al.*,1988).

A evolução tecnológica compreende a utilização de sistema de controle no processo automatizado, evolução nos materiais estruturais que compõe o reator, evolução no projeto dos materiais refratários. Além disso, pode-se citar existência de sistemas de tratamento dos gases resultantes do reator e aprimoramentos de projetos elétricos e magnéticos tanto com relação a materiais quanto com relação ao *design*.

O esquema representativo do princípio de funcionamento de uma cuba de redução eletrolítica Hell-Hérault encontra-se na figura 3.

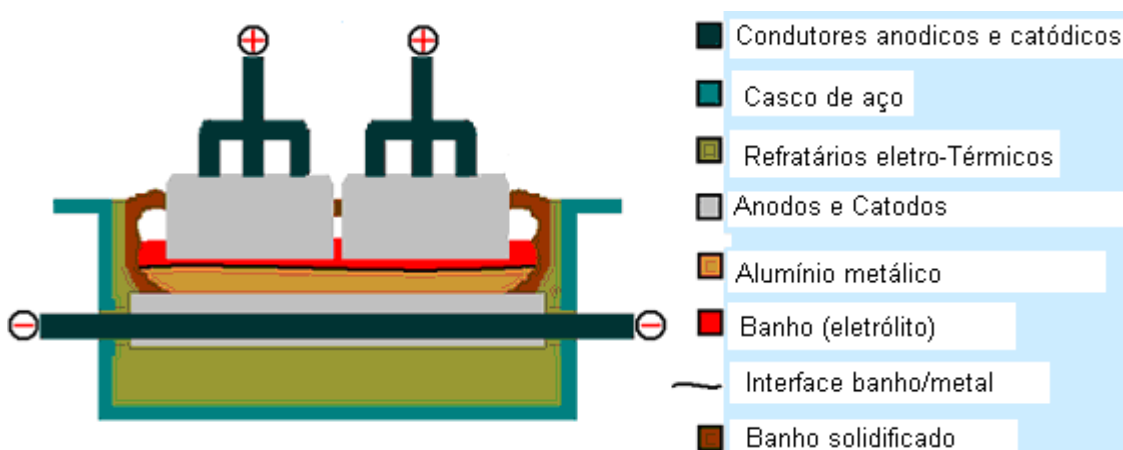


Figura 3: Esquema representativo de uma cuba eletrolítica para a produção de alumínio (Gusberti. V., 2007).

A cuba eletrolítica é formada internamente por duas fases líquidas: banho (fase líquida que compreende o eletrólito do processo de redução) e metal (alumínio metálico líquido). O banho é formado pelo eletrólito (normalmente criolita) e pela alumina que será reduzida na reação de eletrólise. O metal, alumínio líquido, por sua vez, é o resultado da reação. Além disso, existem os condutores anódicos e catódicos, por onde a corrente elétrica é transportada da cuba anterior para a cuba ilustrada (condutores anódicos) e da cuba ilustrada para a próxima cuba (condutores catódicos).

Também, verifica-se a existência do anodo o qual é carregado positivamente e aonde acontece a redução da alumina (Al_2O_3). O alumínio carregado positivamente vai em direção ao catodo (carregado negativamente) e neutraliza-se formando alumínio metálico. Também, para conferir isolamento térmico do equipamento existem camadas de materiais isolantes e refratários com o intuito de manter a temperatura adequada, em torno de 960°C , e favorecer a reação.

As células eletrolíticas operam em série e simultaneamente. Como foi dito anteriormente, o alumínio metálico é mais denso do que o eletrólito depositando-se no topo do bloco catódico, sendo removido através da operação de vazamento.

O anodo é constituído de carbono devido à estabilidade desse material em relação à corrosão. Os produtos gasosos são aceitáveis em relação à degradação ao meio ambiente, e verifica-se um aceitável contato elétrico e suporte físico. A troca do anodo é tradicionalmente realizada no tempo de 3 a 4 semanas dependendo do tipo, do tamanho e da corrente de operação.

O solvente da alumina e o eletrólito utilizado no processo são a criolita (Na_3AlF_6). Dentre as principais características da criolita pode-se citar:

- bom solvente para a alumina, tendo suas reservas concentradas na Groenlândia;
- tem maior voltagem de dissociação do que a alumina;
- tem condutividade elétrica aceitável no estado líquido;

- temperatura de fusão em torno da temperatura de operação da célula;
- tem baixa pressão de vapor;
- é inerte com o carbono e com o alumínio, favorecendo a reação do íon alumínio com o ânodo.

Vários aditivos são adicionados ao eletrólito para modificar as suas propriedades físicas e químicas. Por exemplo, a adição de fluoreto de alumínio AlF_3 e fluoreto de cálcio CaF_2 influenciam fortemente a temperatura de solidificação do eletrólito. No processo, Também, obtêm-se produtos gasosos como o CO_x , fluoretos e outros gases.

A figura 4 mostra um fluxograma do processo evidenciando os principais termos de entrada e saída do processo.

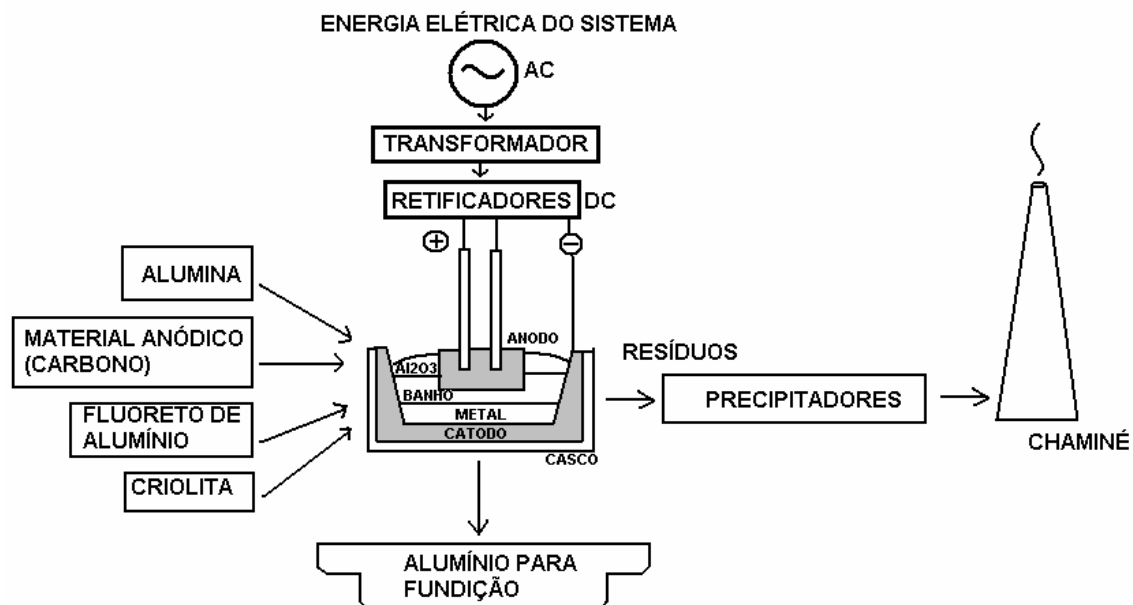


Figura 4: Fluxograma genérico do processo de produção de alumínio (Gusberti, V., 2007).

A figura 4 mostra que as principais entradas de matérias-primas e insumos são alumina, material anódico, fluoreto de alumínio, e criolita e corrente elétrica. As principais saídas são alumínio e gases, os quais serão submetidos à posterior tratamento.

A figura 5 mostra um diagrama, qualitativo típico, de custos do processo de produção de alumínio através de células de Hall-Héroult demonstrando quais matérias-primas resultam em grande impacto nos custos de produção de alumínio metálico.

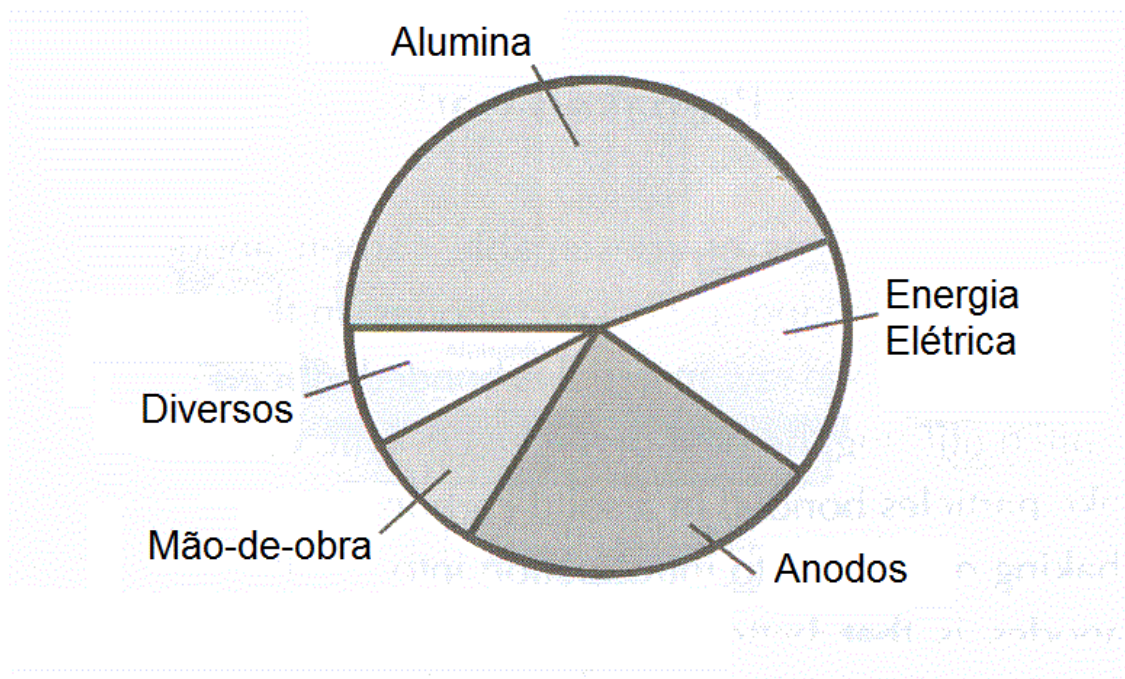


Figura 5: Diagrama qualitativo de custos de um processo de produção de alumínio através de células de Hall-Héroult (Hume, S.M., 1999).

A maior parte dos custos da produção de alumínio primário está relacionada com as matérias-primas e insumos (alumina, anodos e energia elétrica). A energia elétrica, a alumina e os anodos alumina são os maiores custos do processo, evidenciando a necessidade de obtenção de energia, de anodos e de alumina com um preço baixo para poder ter uma planta de produção de alumínio rentável. Em vista disso, o aumento da vida útil dos anodos, através de um dimensionamento adequado do reator, pode resultar em impacto relevante nos custos de fabricação de alumínio primário.

Valores típicos de variáveis operacionais de células de redução eletrolítica para produção de alumínio podem ser encontrados na tabela 1.

Tabela 1: Valores típicos de variáveis operacionais de células de redução eletrolítica para produção de alumínio os quais podem ser encontrados em Schneider, A.F., 2006

Corrente de operação I	150 kA – 400 kA
Queda de potencial por cuba	~ 4 V
Comprimento da cuba (L_X)	~ 10 m
Largura da cuba (L_Y)	~ 4 m
Espessura da camada de banho entre o ânodo e metal, distância ânodo-cátodo (ACD)	35 – 50 mm
Espessura da camada de Alumínio líquido	125 – 250 mm
Nº de ânodos (caso Söderberg) por cuba	1
Nº de ânodos (caso pré-cozidos) por cuba	18 – 36
Eficiência de corrente χ (na eletrólise)	90% - 96%

As perdas de calor no reator metalúrgico estudado têm uma forte dependência com o design e o projeto dos refratários. Portanto, o adequado dimensionamento do isolamento do desses materiais na região inferior da cuba (abaixo do catodo) e nas laterais podem resultar em eficiência energética e economia de energia (Dupuis, M., *et. al.*, 1991). Esse design mantém a temperatura do banho ajustada e controla o fluxo de calor a fim de manter a camada de *ledge* com espessura suficiente para proteger os materiais refratários contra a erosão causada pela agitação do banho e do metal (Dupuis, M., *et. al.*, 1991). Entretanto, se a região abaixo do catodo não tiver isolamento adequado poderá resultar em excessiva cobertura do catodo a qual interfere no escoamento do metal e no aumento excessivo da voltagem da célula (Dupuis, M., *et. al.*, 1991).

O calor gerado na reação de eletrólise, que é perdido para o ambiente, é a soma do fluxo de calor através de duas regiões: uma coberta pelo *ledge* em contato com fase líquida e outra não (László I. K., *et. al.*, 2008). Esses dois mecanismos podem ser descritos como um sistema de duas resistências em paralelo, sendo cada um composto por resistências em série.

Para o caso de existir banho congelado em contato com fase líquida existem três principais resistências: convectiva (na região do líquido junto à frente de solidificação), térmica devido à camada de *ledge* e a outra devido à presença dos materiais refratários. Nas regiões nas quais não exista *ledge* em contato com fase líquida existirá a resistência convectiva e radioativa devido ao fluxo de calor através de superfícies externas e resistência térmica através dos materiais refratários (László I. K., *et. al.*, 2008).

O esquema desses dois mecanismos encontra-se na figura 6:

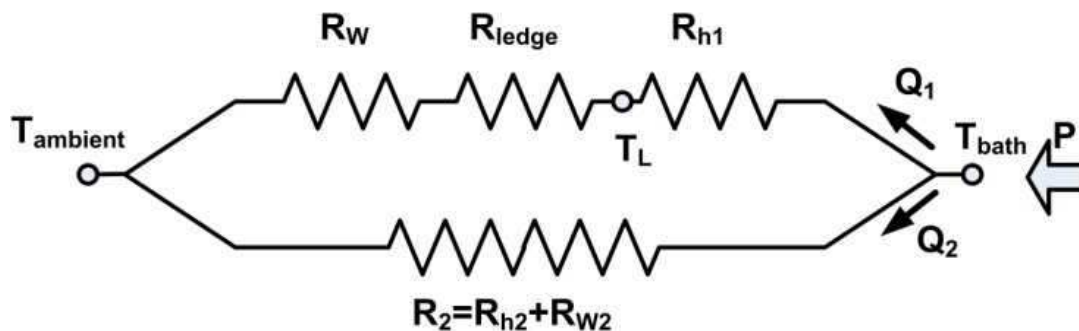


Figura 6: Modelo térmico de resistências em paralelo segundo László I. K., *et. al.*, 2008.

onde P representa o calor total gerado dentro do reator, T_{bath} representa a temperatura do banho, Q_1 representa o fluxo de calor nas regiões que exista *ledge* em contato com fase líquida, R_{h1} representa a resistência convectiva devido ao fluxo de calor através da frente de solidificação, T_L representa a $T_{liquidus}$ do eletrólito, R_{ledge} representa a resistência térmica devido a camada de banho congelado, R_W representa a resistência térmica devido aos materiais refratários, Q_2 representa o fluxo de calor nas regiões nas quais não exista *ledge* em contato com fase líquida, R_2 representa a resistência térmica total do mecanismo 2, R_{h2} representa a resistência convectiva e radioativa devido ao fluxo de calor através de superfícies externas, R_{W2} representa a resistência térmica devido aos materiais refratários e $T_{ambiente}$ representa a temperatura ambiente fora da Cuba.

O esquema representativo do banho congelado, do banho, do metal, da parte do *ledge* que não se encontra em contato com a fase líquida (topo do *crust*) pode

ser encontrado na figura 7. A espessura do banho congelado tem uma relação direta com a quantidade de calor gerada no banho, ou seja, quanto maior o calor menor é a espessura. Diferentes perfis de *ledge* para diferentes calores gerados podem ser encontrados em László I. K., *et. al.*, 2008. Esse artigo, citado anteriormente, mostra a influência do calor gerado na espessura do banho congelado e a sua tendência frente a esses diferentes calores. Também, László I. K., *et. al.*, 2008 mostra que existe um comportamento linear, em uma determinada faixa, entre a variação do *ledge* e o calor total, a espessura do banho congelado não depende exclusivamente do fluxo de calor do mecanismo 1 da figura 6 mas também é dependente do mecanismo 2. Além disso, pequenas mudanças de temperatura geram grandes mudanças no calor total e influenciam o tamanho da camada de *ledge*.

2.2 Físico-química da eletrólise

A formação e a espessura da camada de banho congelado, conhecido como *ledge*, é de grande importância para o desempenho e vida útil da cuba de redução eletrolítica para produção de alumínio. O desempenho é influenciado devido à alteração das correntes elétricas horizontais que se modificam devido à espessura de banho congelado. Também, Essa camada, também, protege os materiais refratários da erosão causada pela agitação do banho e do metal, aumentando a vida útil da cuba.

Em vista disso, o balanço térmico, ou seja, a análise das energias envolvidas no processo de produção do alumínio primário torna-se importante para poder ser realizada uma estimativa sobre a espessura da camada de banho congelado e um dimensionamento adequado do reator.

2.2.1 Características do banho congelado

O *ledge* pode ser dividido em distintos tipos ou regiões (Solheim, A., 2006 e Solheim, A., *et. al.*, 2009): topo do *crust*, *ledge* formado na altura do banho, *ledge* formado entre a interface banho/*ledge* e metal/*ledge* e *ledge* formado na altura do metal. O *crust* é a camada de *ledge* que faz o isolamento térmico do reator metalúrgico na região superior e junto ao anodo, entretanto é a região de banho congelado que não se encontra em contato com a fase líquida. Também, existe o banho congelado na altura do metal e do banho, ou seja, *ledge* em contato com as fases líquidas da célula de redução eletrolítica. Além disso, existe o banho congelado entre a interface banho/*ledge* e metal/*ledge* a qual é caracterizada por um estrangulamento dessa região.

A figura 7 mostra essas diferentes regiões de formação do *ledge*.

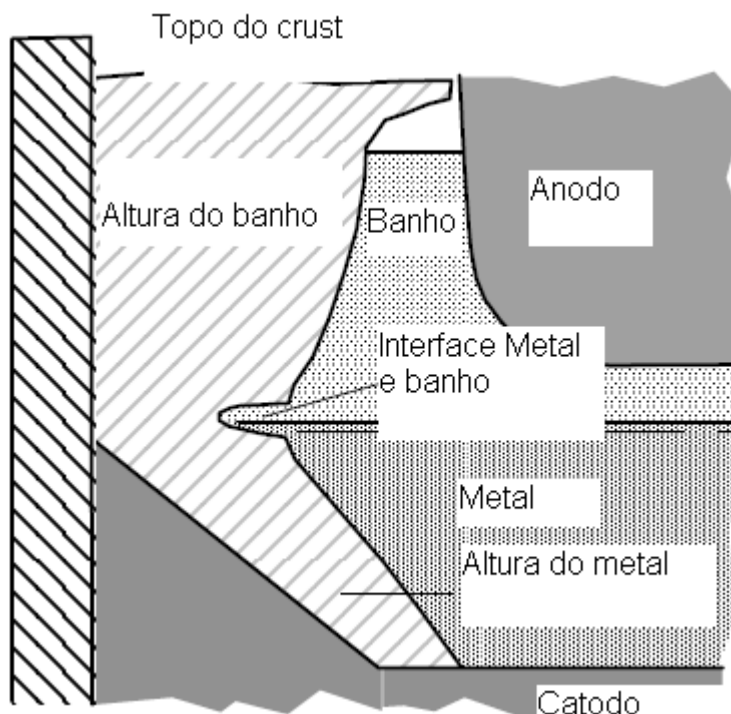


Figura 7: Esquema representativo das regiões de formação do banho congelado (Solheim, A., *et. al.*, 2009).

A figura 7 apresenta uma região com existência de um estrangulamento do banho congelado próximo à região da interface banho/metálico. Segundo Solheim, A., *et. al.*, 2009 a sua existência está relacionada com a existência de um alto coeficiente de transferência de calor local nessa região, o qual foi sugerido pela primeira vez por Peacey, J.G., *et. al.*, 1979. Fraser, K.J., *et. al.*, 1990 fizeram o trabalho focado especificamente na análise desse estrangulamento e descobriram que o fenômeno de formação do *ledge*, na região da interface do banho e do metal, poderia ser reproduzido por um modelo matemático considerando um coeficiente de transferência de calor local muito alto.

Eles quantificaram, também, o valor aproximado desse coeficiente o qual varia na faixa entre 3000 e 4000 W m⁻² K⁻¹. Valores de coeficientes de transferência de calor na interface banho/*ledge* e metal/*ledge* podem ser encontrados em Severo, D.S., *et al.*, 2009 o qual mostra que esses valores variam aproximadamente entre 625 W m⁻² K⁻¹ e 1419 W m⁻² K⁻¹ os quais são muito menores do que aqueles encontrados na região de interface. Isso evidencia que existe um alto coeficiente de transferência de calor na região interfacial banho/metálico que causa um aumento do fluxo de calor nessa região.

Existem algumas hipóteses sobre a existência desse fenômeno e Solheim, A., *et. al.*, 2009 consideram que ele é o resultado do gradiente de tensão interfacial entre as duas fases (banho e metal) fato que move a interface na direção da fase que tem tensão interfacial mais elevada. Diferentes hipóteses podem ser encontradas em outros autores, por exemplo, Chen, Z.D.; *et. al.*, 1998 consideram a existência de ondas na interface que aumentam o fluxo de calor nessa região.

2.2.2 Química da Eletrólise

O banho é formado, principalmente, por alumina dissolvida (Al_2O_3) em um solvente apropriado. Em muitos casos esse solvente é a criolita (Na_3AlF_6). O eletrólito é muito influenciado pelas características desse solvente. A figura 8 apresenta o diagrama de equilíbrio da criolita e a influência da sua composição na Temperatura T_{liquidus} do banho.

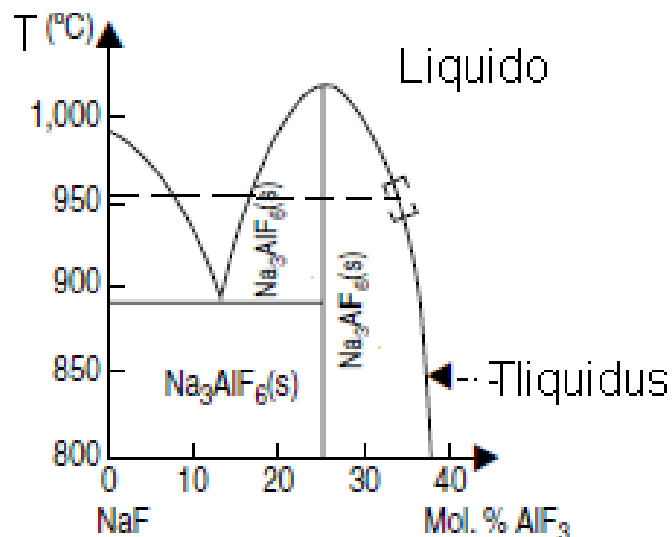


Figura 8: Diagrama de equilíbrio do eletrólito da cuba de redução eletrolítica (Kolas, 2007).

À medida que aumentamos a concentração de AlF_3 verifica-se a formação de uma mistura eutética, a uma concentração de aproximadamente 13% mol de AlF_3 , e abaixamento da T_{liquidus} do banho. Se continuarmos aumentando a quantidade de AlF_3 verifica-se um aumento da T_{liquidus} do eletrólito até um concentração de 25% mol de AlF_3 . Porém, a partir dessa concentração a temperatura de equilíbrio entre a fase líquida e a fase sólida cai muito rapidamente, tornando a concentração de AlF_3 um importante fator de controle do processo de redução, uma vez que uma pequena variação na sua concentração influencia fortemente (grande variabilidade) a T_{liquidus} do eletrólito. A figura 8 mostra que em aproximadamente 960°C, a qual é a

temperatura de operação do reator metalúrgico que é representada pela linha tracejada horizontal, a taxa de variação da temperatura com a composição é alta, fato que pode resultar em variação nas variáveis do sistema de controle do reator.

Em vista disso, o balanço energético da cuba pode ser muito influenciado, nessa região de grande variabilidade, causando variações muito bruscas no *ledge*, fato que pode diminuir a vida útil do reator metalúrgico e a eficiência de corrente do processo. O cálculo da Temperatura $T_{liquidus}$ do banho pode ser encontrado em Solheim, A., *et. al.*, 1996.

2.2.3 Balanço Energético da Cuba de Redução Eletrolítica

Como já foi dito, o processo de eletrólise necessita da passagem de uma grande quantidade de corrente elétrica. Esse foi um dos motivos de seu desenvolvimento após a descoberta da energia elétrica. Esse processo não é espontâneo e por esse motivo necessita de grande quantidade de energia, a qual advém da corrente elétrica disponível.

O calor acumulado dentro do reator metalúrgico é definido como a diferença entre o calor gerado e o acumulado. A energia de entrada está relacionada com a entalpia dos componentes adicionados ao reator e com o calor gerado pela queda de voltagem da célula. Por sua vez, o calor de saída do reator é dependente da entalpia dos componentes de saída do reator e com o calor dissipado para o meio ambiente (Gusberty, V., *et. al.*, 2011).

Em vista disso, utilizando a primeira lei da Termodinâmica podemos definir o balanço de energia da seguinte forma (Gusberti, V., *et. al.*, 2011):

$$Q_{ac} = Q_{in} - Q_{out} \quad (2)$$

$$Q_{ac} = V_{Cell}I + \dot{w}_{Al} \left(\sum \dot{m}_{i_in} H_i(T_{i_in}) - \sum \dot{m}_{i_out} H_i(T_{i_out}) \right) - \frac{(T_B - T_A)}{R_{EqAp}} \quad (3)$$

Onde Q_{ac} representa o calor acumulado dentro reator, Q_{in} representa o calor ganho pelo volume de controle, Q_{out} representa o calor perdido pelo volume de controle, V_{cell} representa a voltagem da célula, I representa a corrente elétrica da célula, w_{Al} representa a taxa mássica de alumínio, m_{i-in} representa a taxa mássica de entrada do componente i dividido por kg de alumínio, $H_i(T_{i-in})$ representa a entalpia do componente i na temperatura de entrada T_{i-in} , m_{i-out} representa a taxa mássica de saída do componente i dividido por kg de alumínio, $H_i(T_{i-out})$ representa a entalpia do componente i na temperatura de entrada T_{i-out} , T_B representa a temperatura do banho, T_A representa a temperatura do ambiente e R_{eqAp} representa a resistência térmica do reator.

Energia associada com as entalpias de entrada e saída dos componentes no volume de controle

A entalpia associada a um componente i pode ser calculada segundo a equação abaixo (Gusberti, V., *et. al.*, 2011).

$$H_i(T) = \Delta_f H_{298}^0 + \int_{298}^T C_p(T) dT \quad (4)$$

onde $H_i(T)$ representa a entalpia da espécie i em uma temperatura T , $\Delta_f H_{298}^0$ representa a entalpia padrão do componente i a 298 K, $C_p(T)$ representa o calor específico do componente i em uma temperatura T e dT representa o diferencial da temperatura.

Variação da entalpia é dada pela diferença entre a entalpia de entrada e a entalpia de saída dos componentes que compõe o volume de controle a ser estudado a qual pode ser definida na equação 5 (Gusberti, V., *et. al.*, 2011).

$$\Delta H_{Tot} = \left(\sum \dot{m}_{i_in} H_i(T_{i_in}) - \sum \dot{m}_{i_out} H_i(T_{i_out}) \right) \quad (5)$$

onde ΔH_{tot} representa a entalpia total.

Segundo Gusberti, V., *et. al.*, 2011 o calor perdido calculado pela equação 5 considerando uma célula moderna é da ordem de 8-9 kWh/ kg Al. Esse valor inclui a quantidade de energia transferida no interior do reator para os gases que saem pelos dutos coletores de ar. Também, Gusberti, V., *et. al.*, 2011 diz que podemos definir a entalpia mínima para a redução da alumina calculando a diferença de entalpia existente entre os produtos (Al, CO₂) a uma temperatura T_B e reatantes (C, Al₂O₃ a uma temperatura ambiente T_A .

$$\Delta H_{Min} = \left(H_{Al}(T_B) + \frac{3M_{CO_2}}{4M_{Al}} H_{CO_2}(T_B) \right) - \left(\frac{M_{Al_2O_3}}{2M_{Al}} H_{Al_2O_3}(T_A) + \frac{3M_C}{4M_{Al}} H_C(T_A) \right) \quad (6)$$

onde ΔH_{min} representa a entalpia mínima, M_{CO_2} representa a massa molar do CO₂, M_{Al} representa a massa molar de Al, $M_{Al_2O_3}$ representa a massa molar de Al₂O₃ e M_C representa a massa molar do carbono, $H_{Al}(T_B)$ representa a entalpia do alumínio a uma temperatura T_B , H_{CO_2} representa a entalpia de CO₂ a uma temperatura T_B , $H_{Al_2O_3}(T_A)$ representa a entalpia de Al₂O₃ a uma temperatura T_A e H_C representa a entalpia do carbono a uma temperatura T_A .

A eficiência energética da célula pode ser calculada através da razão entre a energia mínima requerida para a redução e a energia total fornecida para a célula (Gusberti, V., *et. al.*, 2011).

$$E_{Eff} = 100 \frac{\Delta H_{Min} \dot{W}_{Al}}{V_{Cell} I} \quad (7)$$

onde E_{Eff} representa a eficiência energética da célula.

Conforme Gusberti, V., *et. al.*, 2011 as melhores cubas em operação atualmente têm eficiência energética em torno de 50% e em alguns casos abaixo de 40%.

2.3 Modelos matemáticos

Os modelos matemáticos que são importantes para o desenvolvimento da simulação numérica realizada nesta dissertação estão descritos nos itens a seguir: modelo elétrico e modelo térmico.

2.3.1 Modelo Elétrico

A corrente elétrica passa através dos materiais condutores (haste, anodo, catodo, pasta catódica, ferro fundido e barra coletora).

O balanço de corrente elétrica é governado através da resolução da equação de Laplace (Gusberti, V., 2007):

$$\nabla \cdot (\sigma \nabla \Phi) = 0 \quad (8)$$

onde σ representa a condutividade elétrica, ∇ representa o gradiente de uma propriedade qualquer e Φ representa o potencial elétrico.

A distribuição da densidade de corrente elétrica \vec{J} é definida na equação 9 (Gusberti, V., 2007):

$$\vec{J} = \sigma \nabla \Phi \quad (9)$$

A resistência à passagem da corrente elétrica gera calor. Esse efeito é conhecido como efeito Joule, o qual é um termo fonte na equação 8 de resolução do balanço térmico (Biedler, P *et al.*, 2003):

$$Q = \Omega * \vec{J}^2 \quad (10)$$

onde Q representa o calor gerado por efeito Joule e Ω representa a resistência elétrica (definida pelo inverso da condutividade elétrica).

2.3.2 Modelo Térmico

O princípio sobre o balanço térmico, existente na literatura, pode ser encontrado em Haupin, W.E., 1971 o qual calcula a espessura da camada de eletrólito congelada assumindo valores de coeficientes de convecção térmica entre o banho e o metal e a camada de banho congelado.

A distribuição de temperatura na interface entre o banho congelado e o banho e entre o banho congelado e o metal foi estudada por vários autores. Os primeiros modelos matemáticos que tentaram descrever o comportamento da espessura do eletrólito congelado eram baseados em uma modelagem unidimensional o qual pode ser encontrado em Haupin, W.E., 1971. Stevens McFadden, F. J., 1998 e Bruggeman, J.N., 1998 introduziram dois tipos de interface para o ledge, considerando uma interface em contato com o banho e com o metal e outra interface livre. Modelos bidimensionais de balanço térmico surgiram nos últimos 20 anos (Bruggeman, J.N. *et al.*, 1990).

Entretanto, na atualidade, devido ao avanço ao avanço computacional, um modelo tridimensional de balanço térmico pode ser encontrado em Solheim, A. *et al.*, 2009. Esses modelos são mais completos uma vez que descrevem a variação do *ledge* em todas as direções (x,y,z), descrevendo o seu comportamento de forma mais exata.

Todos os modelos anteriores têm como condição de contorno (de terceira ordem) valores do coeficiente de transferência de calor convectivo. As correlações e metodologias do cálculo do coeficiente convectivo de transferência de calor (Hc) podem ser encontrados na literatura (Severo, D. *et al.*, 2009). A influência do canal anodo-*ledge*, da espessura de imersão do anodo, do canal anodo-anodo, da densidade de corrente no anodo, do ACD, entre outras variáveis, no valor de Hc também pode ser encontrado em Severo, D. *et al.*, 2009.

Entretanto, existe outro tipo de análise, na qual o coeficiente de transferência de calor convectivo é calculado e a fase do metal e do eletrólito são incluídos no domínio de cálculo. Portanto, a simultânea resolução das equações de balanço térmico, elétrico e de magnetohidrodinâmica pode ser encontrado em Romerio, M.V. *et al.*, 2005 no qual são acoplados os efeitos das diferentes variáveis físicas descritas por equações de transporte.

O balanço térmico é resolvido através da solução da equação diferencial de difusão em regime permanente (Biedler, P *et al.*, 2003):

$$\nabla \cdot (kT) + Q = 0 \quad (11)$$

onde k representa a condutividade térmica, T representa a temperatura, e Q representa fonte de calor gerada no domínio (por exemplo efeito Joule).

Valores típicos de condutividade dos materiais refratários que compõe o reator metalúrgico podem ser encontrados em Biedler, P *et al.*, 2003.

3 Metodologia

A análise numérica foi dividida em duas etapas: análise da influência de diferentes *Superheat* (diferença entre temperatura do banho e da temperatura *Tliquidus* do *ledge*) na espessura da camada de banho congelado e validação da simulação numérica. A simulação foi realizada, durante um período de 90 dias, utilizando-se um computador com 8GB de memória RAM DDR2, HD de 250 GB e processador Intel Pentium QUAD. Além disso, foi utilizada uma malha com 2321616 de nós e aproximadamente 22 horas e 15 minutos de simulação.

3.1 Metodologia da Simulação Numérica

O procedimento de cálculo foi feito através da simulação numérica termo-elétrica 3D, ou seja, considerando variação espacial das propriedades físicas em todas as direções. Foi realizada a simulação com a utilização do código comercial Ansys CFX 11, cuja licença foi cedida pela Caeté Engenharia LTDA. O software utilizado nesse trabalho é fornecido pela Ansys e apresenta o método dos volumes finitos baseados em elementos (EbFVM) o qual é uma variação do método de volumes finitos e está presente nos principais códigos comerciais atuais (Maliska, 2004). Esse método tem a vantagem de permitir a elaboração de malhas não-estruturadas e os volumes de controle são construídos com base nos elementos e as informações são armazenadas nos vértices (Maliska, 2004).

A simulação numérica foi realizada considerando um corte de uma cuba de redução eletrolítica real (aproximadamente 7% do tamanho total). Essa metodologia foi utilizada devido ao elevado tempo computacional se fosse considerado uma cuba inteira. A figura 9 apresenta um esquema representativo do conjunto de anodos de uma cuba de redução eletrolítica e está marcado em vermelho o anodo simulado nessa dissertação.

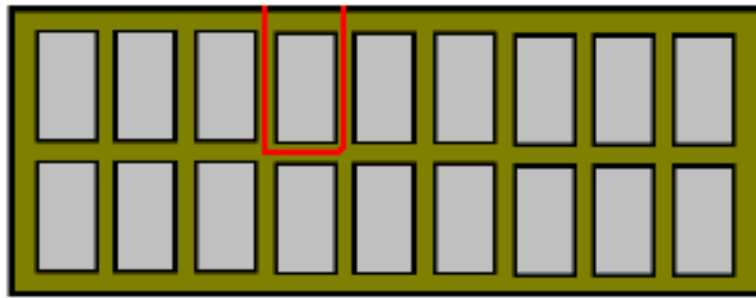


Figura 9: Esquema representativo dos anodos da cuba de redução eletrolítica juntamente com o corte utilizado na simulação numérica (Gusberti, V., 2007).

A malha utilizada na simulação numérica pode ser vista na figura 10, tratando-se de uma vista isométrica da cuba de redução eletrolítica representando o seu *side wall*. O tipo de malha escolhida foi tetraédrica devido ao nível de detalhamento do casco da cuba de redução dificultando a utilização da malha do tipo hexaédrica.

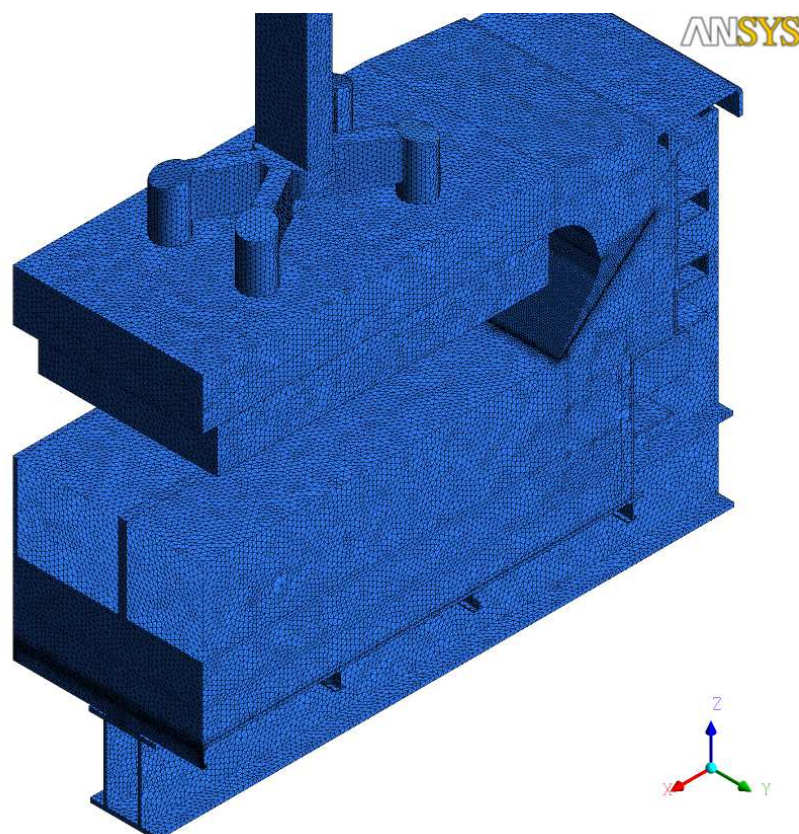


Figura 10: Esquema da malha utilizada na simulação numérica da cuba eletrolítica (foi realizada a simulação de um corte) em perspectiva isométrica.

A malha utilizada nas simulações pode ser vista com detalhes na figura 11, na qual é mostrado um corte na direção do plano XZ mostrando o perfil inicial de *ledge* (região em vermelho) bem como o formato do casco, dos materiais refratários e da haste que compõe o reator metalúrgico estudado. A região com movimentação dinâmica de malha é a marcada em vermelho na altura do metal e do banho e o movimento tem somente 1 grau de liberdade: movimento na direção X.

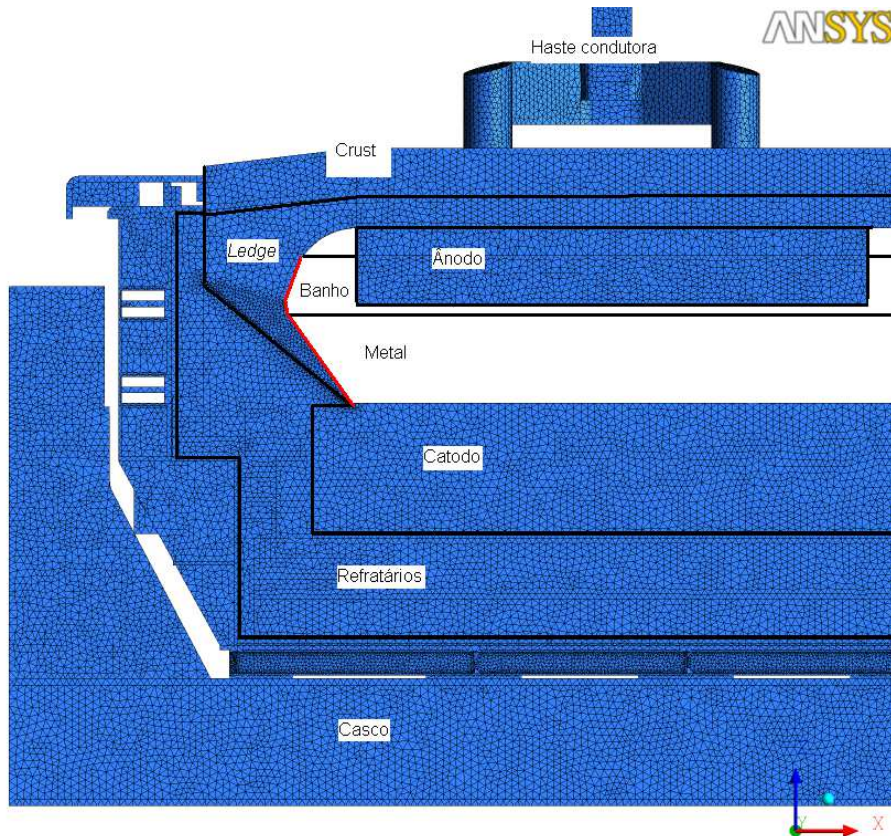


Figura11: Malha em um corte no plano XZ.

Além disso, a figura 12 mostra a malha na região próxima ao *ledge*, mostrando-a com mais detalhes em um corte XZ. Também, verifica-se a representação da frente de solidificação nas primeiras iterações numéricas (usou-se a abreviação de ITER para representar a iteração).

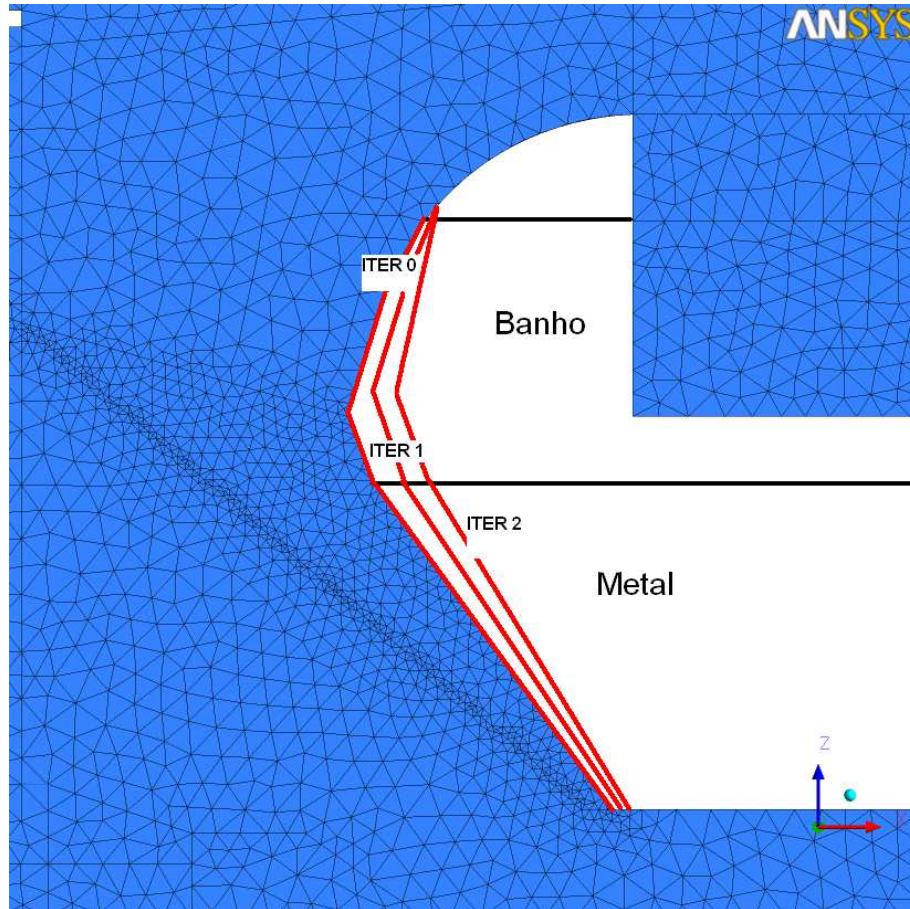


Figura 12: Detalhe da malha em um corte ZX.

Como foi dito anteriormente, foi feita a análise termo-elétrica da cuba de redução eletrolítica. Para isso, foi considerada corrente de 165 kA, sendo colocado um fluxo de corrente elétrica na entrada da haste e na saída da barra coletora. Para o topo do catodo e parte inferior do anodo que está em contato com o eletrólito foi imposto voltagem zero.

Por sua vez, para o cálculo térmico, foi utilizado condição de contorno de terceira espécie (temperatura especificada e coeficiente de transferência de calor), calculando-se um coeficiente aparente considerando os efeitos da convecção e da radiação para os corpos que transmitem radiação. A temperatura do banho foi especificada como 960°C e o coeficiente de transferência de calor para o *ledge* na altura do banho foi considerado 1419 W/m²°C e na altura da fase metal como sendo de 625 W/m²°C. Esses valores podem ser encontrados em Severo, D.S., *et al.*,

2009. Um esquema resumido das condições de contorno da simulação numérica realizada encontra-se na Figura 13.

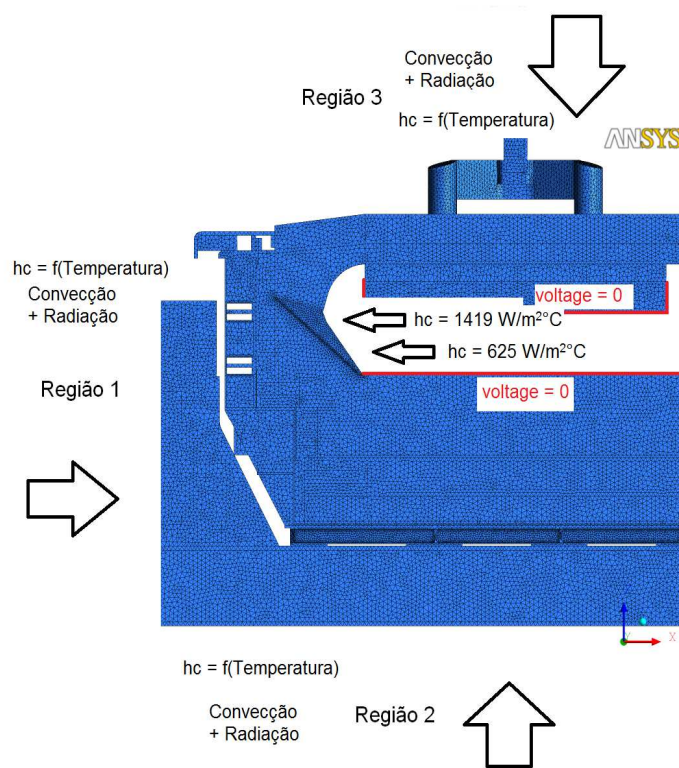


Figura 13: Esquema representativo da condição de contorno de 3º- espécie.

As condições de contorno de 3º- espécie para as regiões 1 a 3 encontram-se nas equações 12 a 17.

Região 1:

$$hc = 4 + 2,10 * 10^{-8} * \frac{(T^4 - T_{inf}^4)}{T - T_{inf}} \quad (12)$$

$$T_{inf} = 50C^0 \quad (13)$$

Região 2:

$$hc = 4 + 2,10 * 10^{-8} * \frac{(T^4 - T_{inf}^4)}{T - T_{inf}} \quad (14)$$

$$T_{inf} = 30C^\circ \quad (15)$$

Região 3:

$$hc = 10 + 3,10 * 10^{-8} * \frac{(T^4 - T_{inf}^4)}{T - T_{inf}} \quad (16)$$

$$T_{inf} = 30C^\circ \quad (17)$$

As seguintes equações são resolvidas na simulação:

- Conservação de energia através da equação de difusão do calor;
- Conservação de corrente elétrica através da equação de Laplace;
- Movimentação dinâmica da malha através de equação de conservação do movimento relativo da malha.

A figura 14 apresenta um fluxograma com a rotina e sequência dos cálculos.

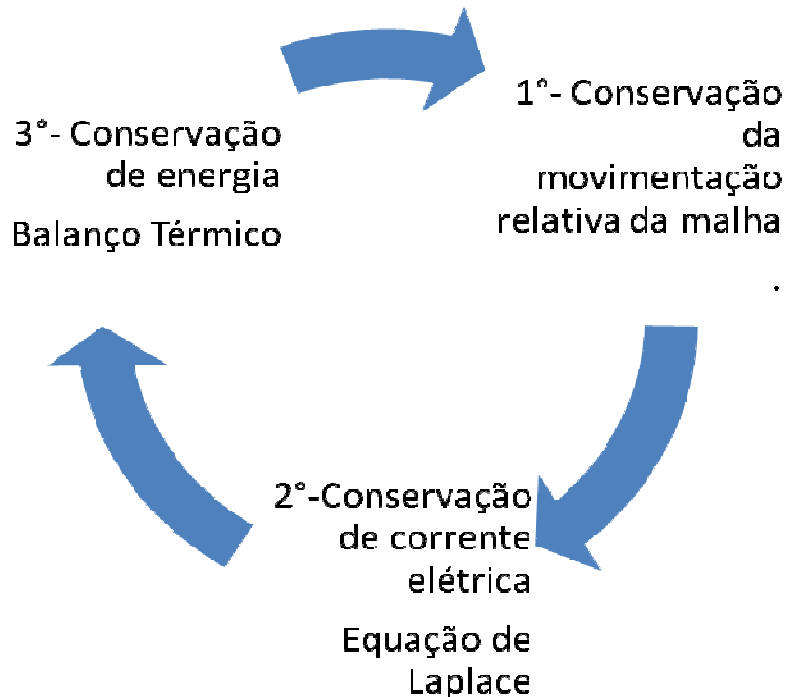


Figura 14: Fluxograma com a Rotina e sequência dos cálculos realizados.

A rotina de cálculo apresentada na figura 14 começa com o cálculo da movimentação relativa da malha. O perfil inicial de espessura de *ledge* não se encontra na temperatura *Tliquidus* uma vez que é uma estimativa da possível posição da isoterma da *Tliquidus*. Em vista disso, necessita-se criar um algoritmo que movimente a fronteira (interface *ledge*/banho e *ledge*/metal) de maneira que a sua temperatura seja igual à *Tliquidus* do *ledge*.

A deformação é calculada em função da diferença de temperatura existente entre a temperatura da fronteira e a *Tliquidus* do banho congelado multiplicada por uma constante a qual pode acelerar a movimentação, diminuindo ou aumentando a robustez do modelo.

Além disso, a movimentação é dissipada aos nodos próximos da fronteira da malha através de uma equação de conservação do movimento relativo (ANSYS CFX MANUAL, 2005):

$$\nabla \cdot (\Gamma_{disp} \nabla \delta) = 0 \quad (18)$$

onde δ representa o movimento relativo e Γ_{disp} representa a robustez ou rigidez como o movimento relativo é propagado aos nodos vizinhos da malha.

Após o cálculo da posição relativa da malha é feito o cálculo da corrente elétrica nos domínios que permitem a passagem de corrente e por último é feito o cálculo do balanço de energia para todos os domínios. Também, foi assumido um critério de parada para o cálculo o qual permite uma variação de até 1°C na temperatura da interface *banho/ledge* e *metal/ledge* parando-se o cálculo quando satisfeito esse critério.

Os *superheat* escolhidos para os cálculos foram respectivamente 6°C, 8°C e 10°C os quais foram informações privadas fornecidas pela empresa Caeté Engenharia. Esses valores são baseados em projetos modernos de cubas reais e eficientes. Os valores de $T_{liquidus}$ para os *superheat* acima é 954°C, 952°C e 950°C respectivamente.

3.2 Metodologia de Validação

A validação do modelo numérico através da comparação dos resultados obtidos na simulação numérica com dados experimentais, os quais se encontram na figura 25, da cuba de redução eletrolítica da Aluar AP155, os quais foram medidos pela Aluar (empresa de produção de alumínio da Argentina). Além disso, a temperatura do banho foi especificada como 960°C, a $T_{liquidus}$ do *ledge* como 954°C e o coeficiente de transferência de calor para o *ledge* na altura do banho foi considerado 1419 W/m²°C e na altura da fase metal como sendo de 625 W/m²°C. A

rotina de cálculo, critério de convergência, malha e demais considerações, foram os mesmos utilizados no item 3.1.

4 Resultados e discussão

Os resultados serão apresentados em duas partes distintas. Primeiramente, foi realizado o cálculo do perfil de temperatura na interface banho/*ledge* e metal/*ledge*, a espessura da camada de eletrólito congelado (*ledge*) e a eficiência energética da cuba para três diferentes *Superheat* (diferença entre temperatura *Tliquidus* do *ledge* e temperatura do banho). Também, na primeira parte dos resultados e discussões está incluída a análise do fluxo de calor na interface banho/*ledge* e metal/*ledge*, da resistência térmica da camada de *ledge* formada e deformação total da interface banho/*ledge* e metal/*ledge*. Depois, foi feita a validação do modelo numérico com dados experimentais da cuba de redução eletrolítica da Aluar AP155 o qual foi medido pela Aluar (empresa de produção de alumínio da Argentina) e publicados em Severo, D. *et al.*, 2009.

4.1 Comparação de diferentes *Superheat* (SH)

A análise do perfil de temperatura, considerando temperatura *Tliquidus* de 954°C, 952°C e 950°C, na interface *ledge*/banho e *ledge*/metal, pode ser visto nas figuras 15, 16 e 17. Além disso, elas apresentam diferentes *Superheat*, cujo critério de escolha dos valores é informação confidencial de Gusberti, V, 2010, o qual é a diferença entre a temperatura do banho e a *Tliquidus* do eletrólito. Em vista disso, como a temperatura do banho foi assumida constante obtêm-se três diferentes *Superheat* a fim de analisar a variação ou sensibilidade do *ledge*. O valor do *Superheat* para a *Tliquidus* de 954°C vale 6°C, para a *Tliquidus* de 952°C vale 8°C e, enfim, *Tliquidus* de 950°C vale 10°C.

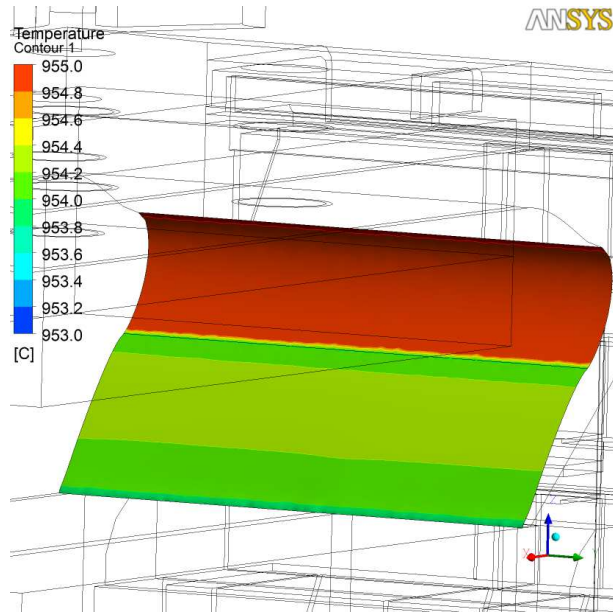


Figura 15: Perfil de temperatura considerando *Tliquidus* de 954°C, *superheat* 6°C.

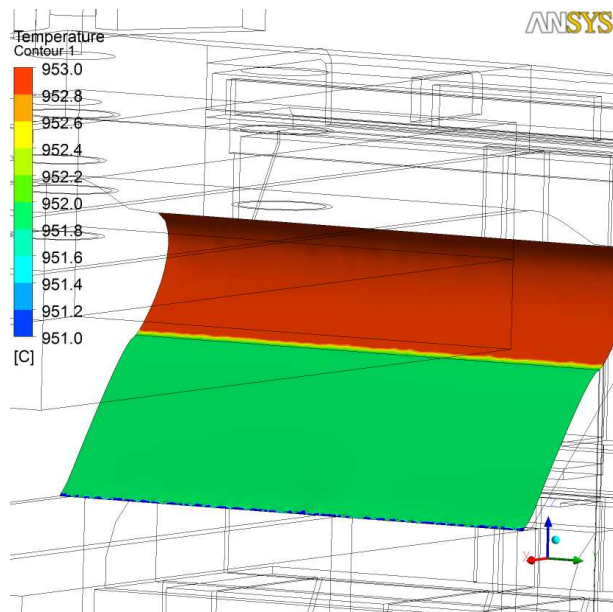


Figura 16: Perfil de temperatura considerando *Tliquidus* de 952°C, *superheat* 8°C.

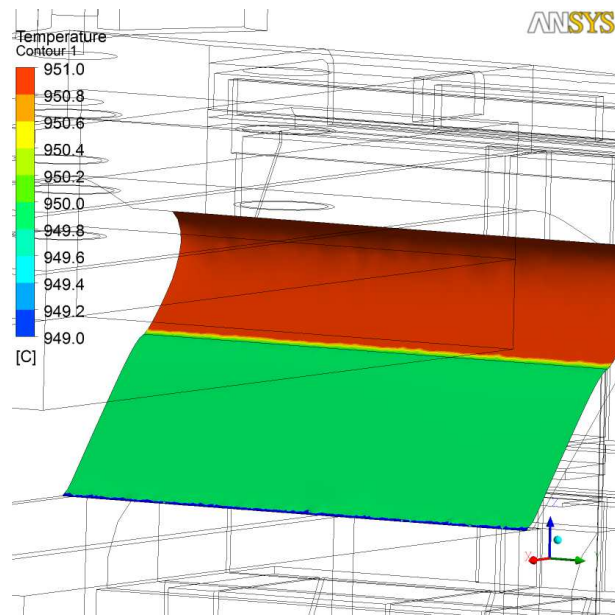


Figura 17: Perfil de temperatura considerando $T_{liquidus}$ de 950°C , *superheat* 10°C .

As figuras 15,16 e 17 mostram que o perfil de temperatura encontra-se dentro do critério de parada escolhido (variação da temperatura da frente de solidificação em 1°C com relação à temperatura $T_{liquidus}$ e critério de convergência menor do que $1e-4$), alcançando o nível de acuracidade proposto. Também, a análise dessas figuras mostra que na parte superior da frente de solidificação (interface *ledge/banho*) os valores das temperaturas são próximos ao limite superior do critério escolhido para o cálculo ($T_{liquidus} + 1^{\circ}\text{C}$). Na parte inferior da frente de solidificação (interface *ledge/metal*) observa-se que os valores das temperaturas são muito próximas à temperatura $T_{liquidus}$, sendo 954°C , 952°C e 950°C respectivamente.

Por sua vez, as figuras 18 e 19 apresentam a variação da espessura da camada de *ledge* com relação à mesma condição inicial.

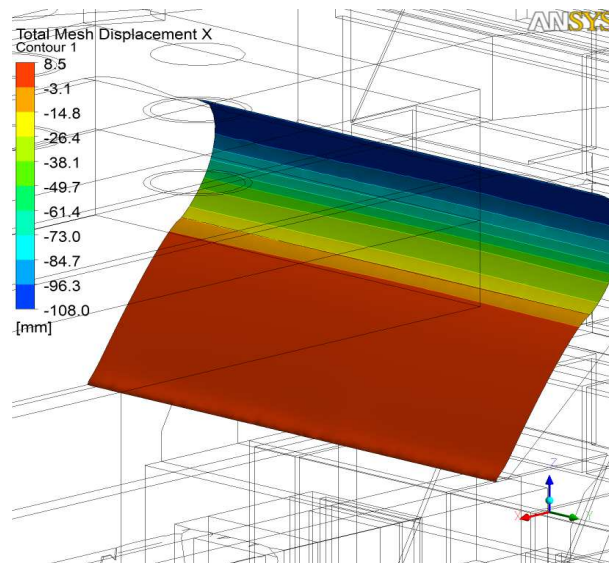


Figura 18: Variação total da malha na direção X para a *Tliquidus* de 954°C, *superheat* 6°C.

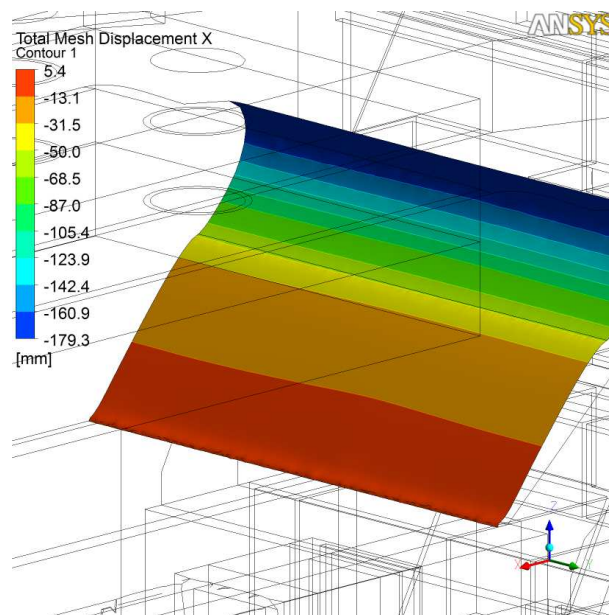


Figura 19: Variação total da malha na direção X para a *Tliquidus* de 952°C, *superheat* 8°C.

Para um SH de 6°C verifica-se que a deformação máxima em módulo foi de 108mm, aumentando para 179,3mm para um SH de 10°C, resultando numa

diminuição da espessura da camada de *ledge*. O algoritmo matemático utilizado na movimentação de malha mostrou-se eficiente na descrição da frente de solidificação uma vez que foi sensível a mudanças $T_{liquidus}$.

As figuras 20, 21 e 22 quantificam o fluxo de calor da fronteira do *ledge* com o banho e com o metal.

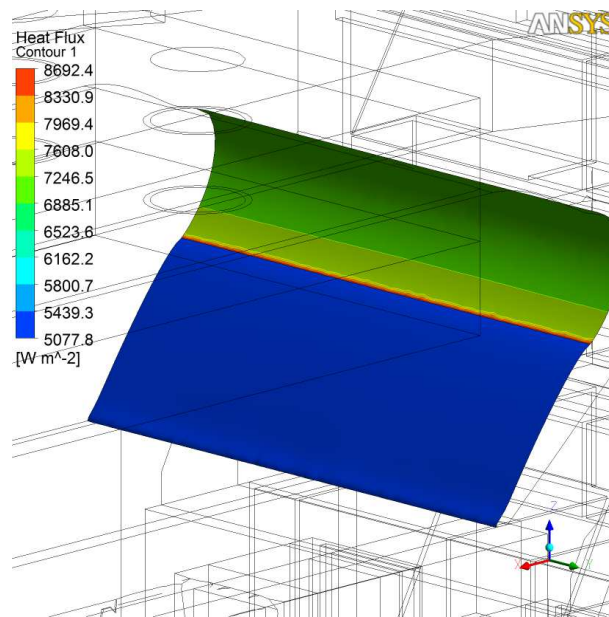


Figura 20: Fluxo de calor na interface *ledge/banho* e *ledge/metal* para a $T_{liquidus}$ de 954°C, *superheat* 6°C.

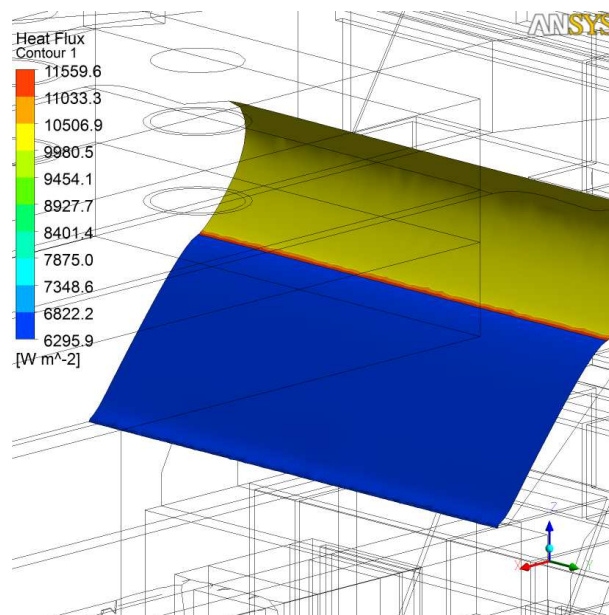


Figura 21: Fluxo de calor na interface *ledge/banho* e *ledge/metal* para a *Tliquidus* de 952°C, *superheat* 8°C.

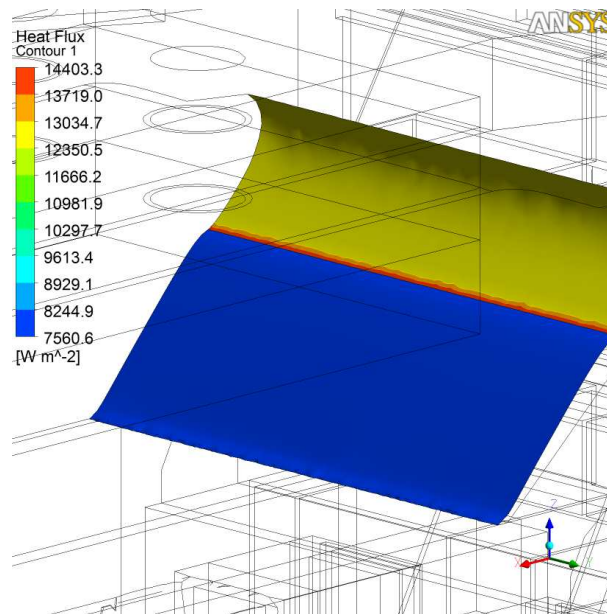


Figura 22: Fluxo de calor na interface *ledge/banho* e *ledge/metal* para a *Tliquidus* de 950°C, *superheat* 10°C.

Observe-se ao analisar as três figuras anteriores, que à medida que aumenta o SH ou diminui a *Tliquidus* do eletrólito aumenta o fluxo de calor através da fronteira. Isso pode ser visto observando os valores máximos e mínimos do fluxo de calor. Por exemplo, para o SH de 6°C o valor mínimo e máximo do fluxo de calor são 5077,8 W/m² e 8692,4 W/m², respectivamente, e para um SH de 10°C tem-se o valor mínimo e máximo de 7560,6 W/m² e 14403,3 W/m². Conseqüentemente, quanto menor a espessura maior é o fluxo de calor na interface.

A figura 23, por sua vez, mostra o perfil de espessura do *ledge* no plano XZ para diferentes SH.

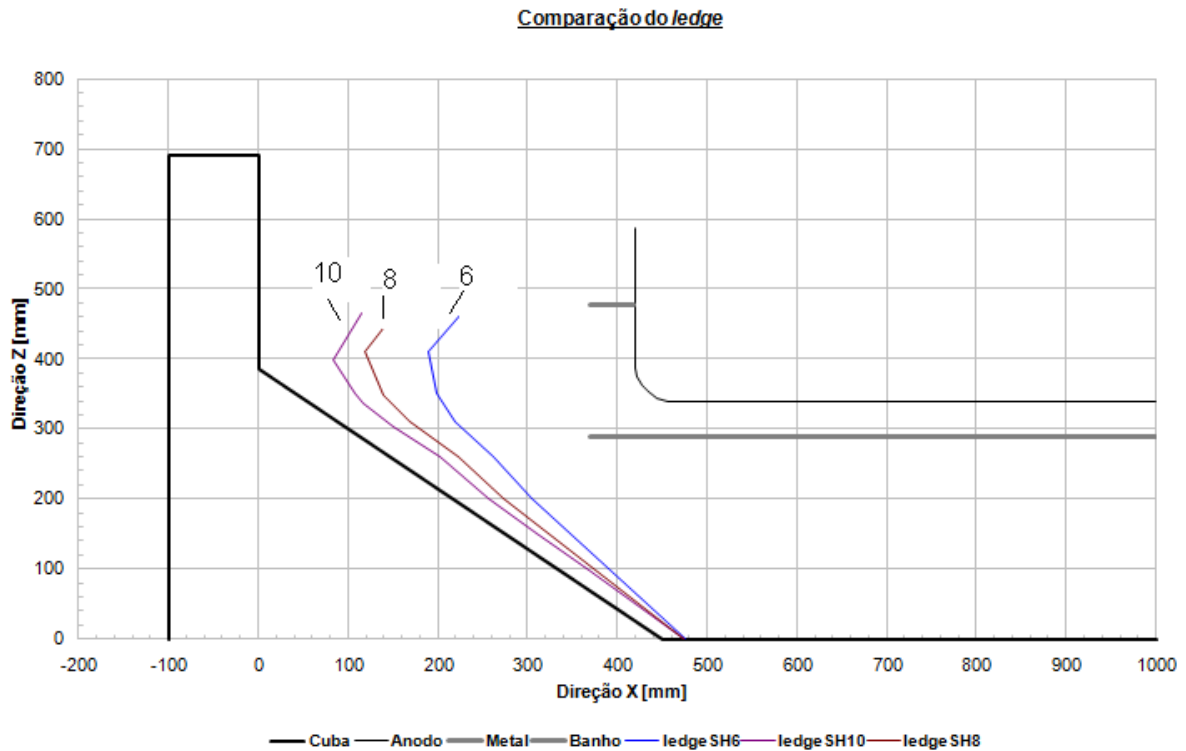


Figura 23: Perfil de espessura do *ledge* no plano XZ para diferentes SH.

A espessura da camada de banho congelado está intimamente ligada ao SH, fato que pode ser claramente observado na Figura 23, da cuba de redução eletrolítica o qual por sua vez está relacionado com a temperatura do banho e com a *Tliquidus* do eletrólito. Essa última está relacionada com a química do banho.

A eficiência energética da Cuba é um importante fator na atualidade, uma vez que as fontes de energia estão ficando cada vez mais escassas e caras. Em vista disso, deve-se minimizar todo o desperdício energético através do dimensionamento do refratário, química do banho e condições de operação. Também, a eficiência energética da cuba é maior para um SH baixo, fato mostrado na Figura 24 que evidencia a influência do SH em relação ao calor total que é perdido na frente de solidificação.

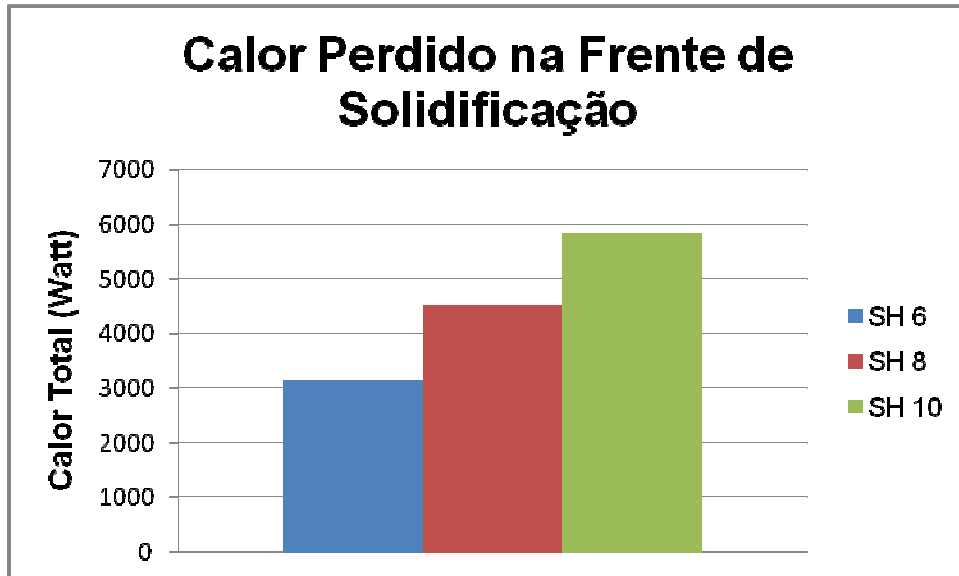


Figura 24: Gráfico do calor perdido pela cuba simulada na região da frente de solidificação considerando um anodo típico.

A razão do aumento do calor perdido com o SH está relacionada com a diminuição da resistência térmica, uma vez que um aumento de SH resulta em diminuição da espessura da camada de *ledge*, a qual pode ser vista na Figura 22. Essa diminuição da espessura resulta em uma diminuição da resistência térmica da camada de *ledge* e, conseqüentemente, aumento o calor total perdido e vice-versa. Entretanto sabe-se que existe um valor prático mínimo para o SH na faixa 8-10°C para que a alumina adicionada no processo seja dissolvida (informação confidencial obtido com Gusberti, V., 2010).

Porém, deve-se considerar que o cálculo foi feito considerando um anodo típico do *side wall* da cuba, podendo-se utilizar a mesma metodologia e rotina de cálculo para calcular os calores envolvidos para o *end wall* da Cuba de Redução Eletrolítica. O tipo de metodologia utilizada, no estudo desenvolvido nessa dissertação, é raramente encontrado na bibliografia internacional, sendo inédito com relação aos trabalhos nacionais.

4.2 Validação

A comparação do resultado da simulação numérica com valores experimentais de uma cuba de redução eletrolítica industrial obtidos da Aluar AP155 encontra-se na Figura 25.

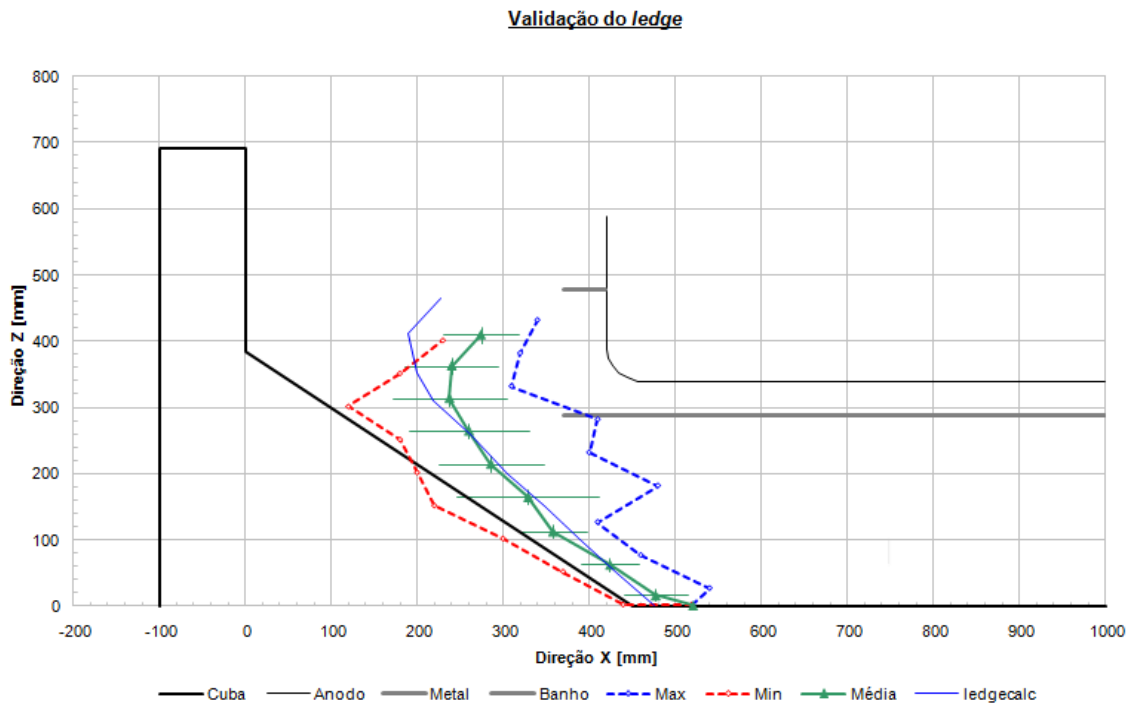


Figura 25: Comparação do perfil de *ledge* obtido no modelo numérico com o perfil médio obtido de dados experimentais de uma cuba de redução eletrolítica real (Aluar AP155).

A figura 25 evidencia que o resultado obtido através da simulação numérica da cuba (linha contínua azul entre as linhas tracejadas) encontra-se dentro da faixa de desvio padrão da curva experimental (curva contínua verde que contém linhas horizontais indicando desvio-padrão) exceto na altura do último ponto (aproximadamente em $Z = 300\text{mm}$). Esse fato pode estar relacionado com erro na estimativa do coeficiente de transferência de calor ou com a consideração de superfície estacionária na região acima do da interface *ledge*/banho. Além disso, observa-se que o formato do perfil do *ledge* encontra-se de acordo com o perfil encontrado em Solheim, A. *et al.*, 2009, Severo, D. *et al.*, 2009 e László I. K., *et al.*,

2008. Observa-se que existe um estreitamento do perfil na interface *banho/metal* tendo em vista que o coeficiente de transferência de calor para a interface *ledge/banho* é maior devido a maior velocidade do escoamento nessa região, resultante da agitação das bolhas (CO_2 oriundo da reação global da eletrólise) que ascendem entre os canais dos anodos foi observado por Severo, D. *et al.*, 2009). Os valores adotados para os coeficientes de transferência de calor para as interfaces citadas anteriormente encontram-se na metodologia do trabalho. Além disso, outro fator igualmente importante para o fato do *ledge* ser mais fino na região do metal pode ser devido ao maior isolamento térmico na altura dessa fase.

5 Conclusões

- O perfil de temperatura encontra-se dentro do critério escolhido (variação da temperatura da frente de solidificação em 1°C com relação à temperatura $T_{liquidus}$ e critério de convergência menor do que $1e-4$), alcançando o objetivo proposto para os três diferentes SH (6°C , 8°C e 10°C). Na parte superior da frente de solidificação (interface *ledge*/banho), os valores das temperaturas são próximos ao limite superior do critério escolhido para o cálculo ($T_{liquidus} + 1^{\circ}\text{C}$). Na parte inferior da frente de solidificação (interface *ledge*/metal), observa-se que os valores das temperaturas são muito próximas à temperatura $T_{liquidus}$, sendo 954 , 952 e 950°C respectivamente;
- Aumento do SH ou diminuição da $T_{liquidus}$ do eletrólito acarreta em aumento do fluxo de calor através da frente de solidificação e vice-versa;
- A espessura da camada de banho congelado está intimamente ligada ao SH da cuba de redução eletrolítica.
- A eficiência energética da cuba é maior para um SH baixo, entretanto na prática existe um valor mínimo na faixa de $8-10^{\circ}\text{C}$ para o *Superheat* para que a alumina adicionada no reator seja dissolvida;
- Aumento de SH resulta em diminuição da resistência térmica da camada de *ledge* e, conseqüentemente, diminuição da espessura da camada de *ledge* e vice-versa;

- O resultado obtido através da simulação numérica da cuba encontra-se dentro da faixa de desvio padrão da curva experimental exceto na altura do último ponto (altura de $Z = 300$ mm);

6 Sugestões para Trabalhos Futuros

- Re-estimar o coeficiente de transferência de Calor da interface *ledge*/banho e considerar superfície com movimentação de malha na região acima da interface *ledge*/banho;

- Estudar sensibilidade e o resultado final obtido para uma condição inicial de espessura de malha diferente da escolhida para essa dissertação.

- Calcular o calor total perdido pela frente de solidificação considerando uma cuba inteira ou utilizando uma nova metodologia de cálculo do fluxo de calor.

REFERÊNCIAS

ABAL- **Associação Brasileira de Alumínio. Site institucional.** Disponível em: <http://www.abal.org.br/industria/perfil.asp> , acessado em: 14 de junho de 2011.

ANSYS CFX MANUAL, Release 10.0, Ansys Inc., Waterloo, Canadá, 2005.

Biedler, P; Banta,L. Analysis and correction of heat balance issues in aluminium reduction cells. *Light Metals*, 2003, pg 441-447.

Bruggeman, J.N. Pot heat balance fundamentals, Proc. 6th Aust. Al Smelting Workshop, 1998, pp.167-189.

Bruggeman, J. N.; Danka, D. J. *Two dimensional thermal modeling of the Hall-Héroult cell*, *Light Metals*, 1990, p. 203-209.

Chen, Z.D.; Taylor, M.P.; Chen, J.J.J. Heat Transfer on a Surface Affected by an Air/Water Interface Undergoing Wave Motion, *Light Metals*, 1998, p. 429-435.

Dupuis, M.; Imad Tabsh, H.G. Thermo-Electric Coupled Field Analysis of Aluminum Reduction Cells Using the ANSYS Parametric Design Language. Alcan International, 1991.

Fisher,W.K; Collin,G; Stadelhofer,J.W. Technischer Kohlenstoff-Herstellung und Anwendung. DGMK, Haupttagung, Spetember 19-21, 423.

Fraser, K.J.; Taylor, M.P.; Jenkin, A.M. Electrolyte Heat and Mass Transport Processes in Hall-Heroult Electrolysis Cells, *Light Metals*, 1990, pg.221-226.

Gjortheim, K; Welch, B.J. *Aluminium Smelter Technology*. 2nd Edition, Aluminium-Verlag, Düsseldorf, 1988.

Gusberti, V. Modelamento Matemático da Instabilidade Magnetohidrodinâmica em Cubas de Redução de Alumínio. Dissertação para obtenção do título de mestre. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Escola de Engenharia, PPGEM, 2007.

Gusberti, V. Caeté Engenharia, informação privada, 2010.

Gusberti, V. ; Severo, D.S.; Welch, B.J.; Skyllas-Kazacos, M. Modelling the Aluminium Smelting Cell Mass and Energy Balance a Tool Based on the 1st Law of Thermodynamics, 10th Australasian Aluminium Smelting Technology Conference, Launceston, Australia, 10th-14th October 2011.

Haupin, W. E.. *Calculating thickness of containing walls frozen from melt*, *Journal of Metals*, July 1971, pp.41-44.

Hume, S.M. *Anode Reactivity-Influence of Raw Material Properties*. 2nd edition, Switzerland, 1999.

IAI- **International Aluminium Institute. Site institucional.** Disponível em: <http://www.world-aluminium.org/About+Aluminium/Production>, acessado em: 14 de junho de 2011.

László I. K.; Dassylva-Raymond, V. FREEZE THICKNESS IN THE ALUMINUM ELECTROLYSIS CELLS. *Light Metals*, 2008, pp.431-436.

Maliska, C.R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. 2.ed. LTC, 2004, p.453.

Peacey, J.G.; Medlin, G.W. Cell Sidewall Studies at Noranda Aluminium, *Light Metals*, 1979, pg 475-492.

Kolas, S. Defining and Verifying the “correlation Line” in Aluminium Electrolysis. *JOM*, 2007.

Romerio, M.V.; Flueck, M.; Rappaz, J.; Safa, Y. Determination and influence of the ledge shape on electrical potential and fluid motions in a smelter. *Light Metals*, 2005, pg 461-468.

Severo, D.S.; Gusberti, V. A modeling approach to estimate bath and metal heat transfer coefficients. *Light metals*, 2009, pp 557-562.

Schneider, A.F. *Desenvolvimento e Validação de uma Metodologia de Análise Eletromagnética de Cubas de Alumínio Utilizando os Pacotes Comerciais ANSYS 9.0 e ALGOR 12.28*. Dissertação para obtenção do título de mestre. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Escola de Engenharia, PPGEM, 2006.

Solheim, A.; Gudbrandsen, H.; Rolseth, S. Sideledge in aluminium cells: the trench at the metal-bath boundary. *Light Metals*, 2009, pg 411-415.

Solheim, A. Towards a proper understanding of sideledge facing the metal in aluminium cells?. *Light metals*, 2006, pg 439-443.

Solheim, A.; Rolseth, S.; Skybakmoen, E.; LISBET Stoen, L.; Sterten, S.; Store, T. Liquidus Temperatures for Primary Crystallization of Cryolite in Molten Salt Systems of Interest for Aluminum Electrolysis. *Metallurgical and Materials Transactions B*, vol. 27B, 1996, pp 739-744.

Stevens McFadden, F. J. *Energy balance and cell dynamics: consideration for cell design, operations and process control*, Proc. 6th Aust. Al Smelting Workshop, 1998, pp. 289-320.