



**UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA  
ESCOLA POLITÉCNICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

**TIAGO DA SILVA MOREIRA**

**SIMULAÇÃO DE UM FORNO DE CRAQUEAMENTO TÉRMICO DE 1,2-  
DICLOROETANO (EDC) UTILIZANDO FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL**

**SALVADOR**

**2018**

**TIAGO DA SILVA MOREIRA**

**SIMULAÇÃO DE UM FORNO DE CRAQUEAMENTO TÉRMICO DE 1,2-DICLOROETANO (EDC) UTILIZANDO FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL**

Dissertação apresentada, como requisito parcial a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química, ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, da Universidade Federal da Bahia.

Orientadora: Prof<sup>ª</sup>. Dr<sup>ª</sup>. Regina Ferreira Vianna

Co-orientador: Prof. Dr. José Luis Gomes Marinho

SALVADOR

2018

*A meus pais, Marcos e Nadja, e minha esposa,  
Camila, por todo apoio dado.*

## **AGRADECIMENTOS**

Primeiramente a Deus, por todas as bênçãos concedidas.

A minha orientadora, Prof.<sup>a</sup> Regina Vianna, e meu co-orientador Prof<sup>o</sup> Luis Marinho, pela oportunidade, pelos conselhos e todo aporte dispensado à realização deste trabalho.

Um agradecimento especial a José Milton pela participação efetiva na orientação e correção desse trabalho.

A minha família, meus pais, Nadja e Marcos, meu irmão, Lucas, e minha esposa, Camila, que com toda dedicação, paciência e amor, ensinaram-me que através da educação pode-se atingir a plenitude da vida, e por sempre terem me apoiado incondicionalmente em todas as etapas que trilhei.

Meus sogros, Antônio e Fátima, pelo acolhimento, apoio e confiança durante os anos de mestrado.

Aos amigos e colegas de universidade, em especial, Elayne, Jordan, Yaimé, Marina e Maurício pelas muitas alegrias proporcionadas durante esses anos pós- graduação.

Aos membros do laboratório Lassop - UFAL, em especial, Prof<sup>o</sup> João Inácio, Prof<sup>o</sup> Leonardo, Kleber, Rodrigo, Bárbara, Flávia pelo apoio diário na conclusão da minha dissertação.

Ao CNPq pela concessão da bolsa de pesquisa durante a realização desse trabalho.

Aos demais professores do corpo docente do Programa de Pós-graduação de Engenharia Química – PPEQ que com maestria mostraram-me o que de mais belo e útil a engenharia pode ter.

*“O sucesso nasce do querer, da  
determinação e persistência em se chegar a  
um objetivo. Mesmo não atingindo o alvo,  
quem busca e vence obstáculos, no mínimo  
fará coisas admiráveis.”*

José de Alencar

## RESUMO

Os fornos de craqueamento térmico tem uma grande importância na cadeia petroquímica, principalmente nos setores da primeira e da segunda geração desse ramo industrial. Setores esses que geram insumos básicos para fibras, resinas, plásticos e produtos químicos. Seu funcionamento é baseado na quebra de grandes hidrocarbonetos, utilizando para isto grandes variações de pressão e temperatura via reação química de combustão. Visando uma melhor compreensão deste fenômeno para fins de predição de variáveis e de otimização, esse trabalho tem como proposta analisar a fluidodinâmica da combustão na seção de radiação de um forno de craqueamento térmico de 1,2-dicloroetano, através do uso do software ANSYS CFX® 13.0. A simulação é baseada no modelo Eddy-Dissipation para a combustão, o modelo k-ε para a turbulência e na comparação dos resultados obtidos para quatro diferentes modelos de transferência de calor por radiação: P1, Rosseland, DTM e Monte Carlo. Os resultados obtidos indicam que os modelos mais adequados são os P1 e DTM, quando comparadas as predições de temperaturas desses modelos com os dados do equipamento industrial. Em geral, o modelo demonstra grande potencial para uso em predições de variáveis de processo, tais como temperatura, concentração do CO<sub>2</sub>, velocidades dos gases formados e para a otimização do ponto ótimo de localização de instrumentos medidores de temperatura.

**Palavras chave:** forno de craqueamento, 1,2-dicloroetano, CFD.

## ABSTRACT

The thermal cracking furnaces are of great importance in the petrochemical chain, especially in the first and second generation sectors of this industrial branch. These sectors generate basic inputs for fibers, resins, plastics and chemicals. Its operation based on the breaking of large hydrocarbons, using for this great variations of pressure and temperature via chemical reaction of combustion. Aiming at a better understanding of this phenomenon for the purpose of variable prediction and optimization, this work aims to analyze the fluid dynamics of the combustion in the radiation section of a 1,2-dichloroethane thermal cracking furnace through the use of software ANSYS® CFX 13.0. The simulation based on the Eddy-Dissipation model for combustion, the k- $\epsilon$  model for turbulence and the comparison of results for four different models of radiation heat transfer: P1, Rosseland, DTM and Monte Carlo. The results indicate that the most suitable models are the P1 and DTM, when comparing the predictions of temperatures of these models with the data of the industrial equipment. In general, the model shows great potential for use in predictions of process variables, such as temperature, CO<sub>2</sub> concentration, formed gas velocities and for the optimization of the optimum point of location of temperature measuring instruments.

**Keywords:** cracking furnace, 1,2-dichloroethane, CFD.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1.1 – Cadeia petroquímica.....	7
Figura 3.2.1 – Consumo mundial de MVC em 2016 .....	8
Figura 3.3.1 –Unidade simplificada de um forno de craqueamento de 1,2-EDC.....	10
Figura 3.4.1 – Forno de craqueamento térmico.....	11
Figura 3.4.2 –Arranjo típico de forno de craqueamento.....	11
Figura 3.6.1–Espectro de onda eletromagnética.....	13
Figura 5.1.1 – Geometria do forno de craqueamento térmico.....	30
Figura 5.1.2 –Arranjo do forno de craqueamento térmico. ....	31
Figura 5.1.3 –Geometria dos queimadores .....	32
Figura 5.2.1 – Arranjo da malha gerada no forno de craqueamento .....	32
Figura 5.4.1 – Porcentagem das potências de cada fileira de queimadores.....	35
Figura 6.1.1 – Plano YZ no comprimento 0,915 m.....	38
Figura 6.1.2 – Plano ZX no comprimento 15,24 m.....	39
Figura 6.1.3 – Plano XY no comprimento 4,295 m .....	39
Figura 6.1.4 – Variação de temperatura no forno em uma vista superior do forno no plano XY para a malha de 1,5 milhões de elementos.....	42
Figura 6.1.5 – Variação de temperatura no forno em uma vista lateral do forno no plano YZ para a malha de 1,5 milhões de elementos .....	42
Figura 6.1.6 – Variação de temperatura no forno em uma vista no forno no plano ZX para a malha de 1,5 milhões de elementos. ....	43
Figura 6.1.7 – Variação de temperatura no forno em uma vista superior do forno no plano XY para a malha de 5,4 milhões de elementos.....	44
Figura 6.1.8 – Variação de temperatura no forno em uma vista lateral do forno no plano YZ para a malha de 5,4 milhões de elementos .....	44
Figura 6.1.9 – Variação de temperatura no forno em uma vista no forno no plano ZX para a malha de 5,4 milhões de elementos .....	45
Figura 6.1.10– Variação de temperatura no forno em uma vista superior do forno no plano XY para a malha de 8,9 milhões de elementos.....	46
Figura 6.1.11– Variação de temperatura no forno em uma vista lateral do forno no plano YZ para a malha de 8,9 milhões de elementos .....	46
Figura 6.1.12 – Variação de temperatura no forno em uma vista no forno no plano ZX para a malha de 8,9 milhões de elementos .....	47

Figura 6.2.1 – Localização dos instrumentos de medição de temperatura da superfície externa da tubulação do reator .....	48
Figura 6.2.2 – Localização dos pontos para o cálculo da média de temperatura .....	49
Figura 6.2.3 – Distribuição de temperatura ao longo do reator tubular através do modelo P-1 .....	51
Figura 6.2.4 – Distribuição de temperatura ao longo do reator tubular através do modelo Rosseland .....	52
Figura 6.2.5 – Distribuição de temperatura ao longo do reator tubular através do modelo DTM .....	53
Figura 6.2.6 – Distribuição de temperatura ao longo do reator tubular através do modelo Monte Carlo .....	54
Figura 6.3.1 – Linhas de correntes de velocidade para o modelo P1 .....	55
Figura 6.3.2 – Linhas de correntes de velocidade para o modelo Rosseland .....	56
Figura 6.3.3 – Linhas de correntes de velocidade para o modelo DTM .....	57
Figura 6.3.4 – Linhas de correntes de velocidade para o modelo Monte Carlo .....	58
Figura 6.3.5 – Vetores de velocidade para o modelo P1 .....	59
Figura 6.3.6 – Vetores de velocidade para o modelo Rosseland .....	59
Figura 6.3.7 – Vetores de velocidade para o modelo DTM .....	60
Figura 6.3.8 – Vetores de velocidade para o modelo Monte Carlo .....	60
Figura 6.3.9 – Temperatura para o modelo P1 .....	61
Figura 6.3.10 – Temperatura para o modelo Rosseland .....	62
Figura 6.3.11 – Temperatura para o modelo DTM .....	63
Figura 6.3.12 – Temperatura para o modelo Monte Carlo .....	64
Figura 6.3.13 – Intensidade de radiação para o modelo P1 .....	65
Figura 6.3.14 – Intensidade de radiação para o modelo DTM .....	66
Figura 6.3.15 – Fração mássica de CO <sub>2</sub> para o modelo P1 .....	67
Figura 6.3.16 – Fração mássica de CO <sub>2</sub> para o modelo Rosseland .....	67
Figura 6.3.17 – Fração mássica de CO <sub>2</sub> para o modelo DTM .....	68
Figura 6.3.18 – Fração mássica de CO <sub>2</sub> para o modelo Monte Carlo .....	68

## LISTA DE TABELAS

Tabela 3.8.1 – Valores das constantes empíricas do modelo k- $\epsilon$ padrão .....	20
Tabela 5.4.1 – Propriedades dos fluidos de combustão.....	34
Tabela 5.4.2 – Condições iniciais de velocidade.....	34
Tabela 5.4.3 – Condições iniciais do sistema .....	35
Tabela 5.4.4 – Características da simulação.....	35
Tabela 6.1.1 – Número total de elementos, temperaturas médias, erro relativo, erro relativo médio e o tempo de processamento.....	40

## LISTA DE GRÁFICOS

Gráfico 3.1.1 – Faturamento da indústria química pr segmento de 2016 em bilhões de dólares.....	2
Gráfico 6.1.1 – Número total de elementos com suas temperaturas médias em cada plano .....	41
Gráfico 6.1.2 – Número total de elementos com o tempo de processamento. ....	41
Gráfico 6.2.1 – Erros relativos dos modelos de radiação com os dados industriais.....	50

## **LISTA DE SIGLAS**

CFD – Fluidodinâmica Computacional (sigla em inglês)

DTM – Modelo transferência discreta (sigla em inglês)

DOM – Método de ordenadas discreta (sigla em inglês)

EDC – Dicloroetano

EDP – Equação diferencial parcial

FCC – Craqueamento catalítico fluidizado (sigla em inglês)

MVC – Monocloreto de vinila

MVF – Método dos volumes finitos

PVC – Policloreto de vinila

RTE – Equação de radiação espectral (sigla em inglês)

## LISTA DE SÍMBOLOS

a – Fator pré-exponencial (-)

A – Constante do modelo Eddy-Dissipation (-)

B – Constante do modelo Eddy-Dissipation (-)

C – Constantes usadas nos modelos de turbulência (-)

E – Poder emissivo ( $\text{W/m}^2$ )

G – Constante do modelo de turbulência do comprimento de mistura de Prandtl e de Prandtl-Kolmogorov (-)

G – Irradiação ( $\text{W/m}^2$ )

$h_{\text{tot}}$  – Entalpia total (J)

k – Energia cinética turbulenta ( $\text{m}^2/\text{s}^2$ )

p – Pressão (Pa)

t – Tempo (h)

T – Temperatura (K)

$S_M$  – Soma das forças no corpo (-)

$S_E$  – Fonte de energia (-)

u – Componente cartesiana da velocidade (m/s)

v – Componente cartesiana da velocidade (m/s)

V – Vetor de volume ( $\text{m}^3$ )

Da – Número de Damköhler (-)

$\tau$  – Tensão de cisalhamento ( $\text{N/m}^2$ )

$\rho$  – Massa específica ( $\text{kg/m}^3$ )

$\Phi$  – Dissipação de calor (-)

$\mu$  – Viscosidade absoluta (N.s/m<sup>2</sup>)

$\mu_{\text{eff}}$  – Viscosidade efetiva (N.s/m<sup>2</sup>)

$\mu_t$  – Viscosidade turbulenta (N.s/m<sup>2</sup>)

$\sigma$  – Constante de Stefan-Boltzmann (W/(m<sup>2</sup>.K<sup>4</sup>))

$\alpha$  – absorvidade (-)

$\varepsilon$  – emissividade (-)

$\Gamma$  – Constante difusiva (-)

$\lambda$  – Condutividade térmica (W/m.K)

$\varphi$  – Grandeza escalar (-)

$\Omega$  - ângulo do sólido (-)

## SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	1
1.1. MOTIVAÇÃO.....	3
2. OBJETIVOS.....	4
2.1. OBJETIVOS GERAIS.....	4
2.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	4
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	5
3.1. SETOR PETROQUÍMICO.....	5
3.2. PRODUÇÃO MUNDIAL DE MVC.....	7
3.3. PROCESSO DE MVC.....	8
3.4. PROCESSO DE CRAQUEAMENTO TÉRMICO.....	10
3.5. COMBUSTÃO DE HIDROCARBONETO.....	11
3.6. TRANSFERÊNCIA DE CALOR.....	12
3.6.1. RADIAÇÃO.....	12
3.7. FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL.....	13
3.7.1. DEFINIÇÃO.....	13
3.7.2. HISTÓRICO.....	14
3.7.3. ETAPAS DE SIMULAÇÃO EM CFD.....	14
3.7.3.1. PRÉ-PROCESSAMENTO.....	15
3.7.3.2. RESOLUÇÃO.....	15
3.7.3.3. PÓS-PROCESSAMENTO.....	16
3.8. MODELO MATEMÁTICO DE CFD.....	16
3.8.1. EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÕES.....	16
3.8.1.1. CONSERVAÇÃO DE MASSA.....	16
3.8.1.2. CONSERVAÇÃO DE MOVIMENTO.....	17
3.8.1.3. CONSERVAÇÃO DE ENERGIA.....	17
3.8.2. MODELO DE TURBULÊNCIA.....	18
3.8.2.1. MODELO k-ε.....	18
3.8.3. MODELO DE COMBUSTÃO.....	20
3.8.3.1. MODELO EDDY-DISSIPATION.....	21
3.8.4. MODELOS DE RADIAÇÃO.....	22
3.8.4.1. MODELO P1.....	23

3.8.4.2. MODELO DE ROSSELAND .....	24
3.8.4.3. MODELO DE DISCRETE TRANSFER .....	25
3.8.4.4. MODELO DE MONTE CARLO .....	26
4. ESTADO DA ARTE .....	27
5. METODOLOGIA.....	30
5.1. ESTUDO DE CASO.....	30
5.2. GERAÇÃO DE MALHA .....	32
5.3. MODELAGEM MATEMÁTICA .....	33
5.4. CONDIÇÕES INICIAIS E DE CONTORNO .....	34
5.4.1. PROPRIEDADES DOS FLUIDOS .....	34
5.4.2. CONDIÇÕES DE PROCESSO E OPERACIONAIS.....	34
5.4.3. NATUREZA DA MODELAGEM .....	35
6. RESULTADOS .....	37
6.1. INFLUÊNCIA DE MALHA .....	37
6.2. INFLUÊNCIA DOS MODELOS DE RADIAÇÃO.....	48
6.3. ANÁLISE QUALITATIVA .....	54
6.3.1. LINHAS DE CORRENTE DE VELOCIDADE.....	54
6.3.2. VETORES DE VELOCIDADE.....	58
6.3.3. TEMPERATURA .....	61
6.3.4. INTENSIDADE DE RADIAÇÃO.....	64
6.3.5. FRAÇÃO MÁSSICA DE CO <sub>2</sub> .....	66
6.4. CONSIDERAÇÕES FINAIS .....	69
7. CONCLUSÕES .....	70
8. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	71
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	72
APÊNDICE I.....	76



## 1. INTRODUÇÃO

O 1,2-dicloroetano (EDC) é a matéria-prima para produção de monocloreto de vinila (MVC), que por sua vez é um dos mais importantes e maiores produtos químicos do mundo. O MVC é usado principalmente para a produção de resinas de copolímero e homopolímero de policloreto de vinila (PVC). O PVC tem a vantagem de ser utilizado em processos de conversão e fabricação com grande flexibilidade, de forma que os produtos cobrem uma ampla gama, incluindo tubos e conexões, perfis e tubos, revestimentos, fios e cabos, janelas, portas, pisos, filmes e chapas, e garrafas. Enquanto os mais importantes mercados finais de uso final são a construção comercial, residencial e não-residencial, uma ampla variedade de produtos convertidos em PVC também é utilizada nos mercados agrícola, elétrico (cabo) e de saúde. A cadeia de vinílicos, compreendendo o 1,2-dicloroetano (EDC), o monocloreto de vinila (MVC) e o policloreto de vinila (PVC), é um componente chave dos setores petroquímicos e termoplásticos globais. A indústria de vinílicos e a MVC, como parte da cadeia de vinílicos, tem um histórico de mudanças, os fabricantes saíram e/ou consolidaram, e novas empresas foram criadas ao longo das décadas. A tecnologia de fabricação foi aprimorada do ponto de vista de segurança, meio ambiente, qualidade e escala de produção (IHS, 2017).

Na escala de produção encontram-se os equipamentos necessários para transformar em produto. Segundo Oliveira Jr. (2014), o MVC é produzido comercialmente em larga escala através da decomposição térmica do 1,2-dicloroetano (EDC) em fornos de pirólise.

O setor petroquímico vem numa constante mutação tecnológica, por estar sempre em um processo de mudança em busca de processos mais econômicos, descobrimento de novos derivados; milhares de produtos são oriundos da petroquímica. Por sua complexa tecnologia, a petroquímica, principalmente a de produtos básicos, exige grande concentração de capital e baixa intensidade do fator trabalho. É de elevado automatismo, com grande mobilização de recursos (TORRES, 1997).

Dentre as principais ferramentas tecnológicas usadas para pesquisas envolvendo processos industriais estão os simuladores computacionais, onde existe uma gama de

softwares comerciais de acordo com o estudo realizado. Para estudos envolvendo escoamento e transferência de calor de fluidos existe a Computacional Fluid Dynamics – CFD a qual, segundo Santomouris e Wouters (2006); Shen, Zhang e Bierg (2012), as equações de transporte executam as simulações baseadas em um volume de controle geométrico, representado pela malha, com a forma e características físicas idênticas ao sistema real em estudo. Tendo como suas principais vantagens: um menor custo financeiro, de recursos (computador e software), de tempo para obter resultados, se comparado à construção de uma escala piloto e também por agregar a alta tecnologia aos processos indústrias, onde é uma tendência de mercado que está cada vez mais alinhada com a Indústria 4.0, com isso, torna-se um dos pilares dessa nova revolução industrial.

Os fenômenos que regem o processo do forno de craqueamento englobam os princípios de conservação de massa, momento e energia que aparecem na forma de complexos sistemas de equações diferenciais parciais (EDP). Com o método dos elementos finitos, que procura dividir um domínio em volumes menores e aplicar as equações de conservação e condições iniciais a cada elemento individual, a fluidodinâmica computacional, a partir de considerações de interdependência de um elemento com seus vizinhos, busca calcular esses sistemas de EDP de modo prático e confiável (OLIVEIRA, 2015).

## 1.1. Motivação

Os fornos de craqueamento térmico vêm sendo cada vez mais observados e estudados (GHASHGHAEE E KARIMZADEH, 2007; ZHENG *et al.*, 2015; LIU *et al.*, 2015). Apesar desse equipamento ser muito conhecido por décadas nas refinarias de petróleo, foi a partir da década de 70 que iniciaram trabalhos referente aos fornos de pirólises, onde foi possível compreender os principais problemas do equipamento através da modelagem e simulação, problemas tais como: além da obtenção de altas conversões, a formação de coque no interior das tubulações do reator e a eficiência térmica. Isso acarreta alto consumo de combustível que fornece baixo rendimento de conversão no produto. Com isso, segundo Schirmeister (2009), a necessidade de parada de operação para desobstrução das tubulações do equipamento gerando impactos na produção do seu produto (PVC) que tem grande valor comercial, refletindo na receita final da unidade industrial.

A radiação térmica através da combustão é o principal fenômeno dos fornos de craqueamento térmico e para a solução desse fenômeno vem sendo usado a técnica de CFD, a fim de entender o seu comportamento (HABIBI *et al.*, 2007; HU *et al.*, 2012; HU *et al.*, 2016), porém apenas alguns modelos de radiação térmica, como: P1, DTM, DOM são utilizados para sua solução.

A principal motivação para a realização deste trabalho está voltada para o seu potencial impacto na indústria, principalmente a petroquímica. A compreensão teórica do problema, bem como, a proposta de medidas que venham a mitigá-lo, irá fornecer uma ferramenta de acompanhamento do processo, conferindo uma maior confiabilidade e segurança ao processo de craqueamento térmico.

## **2. OBJETIVOS**

### **2.1. Objetivos gerais**

Realizar a modelagem e simulação de um forno de craqueamento térmico de 1,2 – dicloroetano, visando determinar o melhor modelo de transferência de calor por radiação para o equipamento.

### **2.2. Objetivos específicos**

- Modelar e simular a câmara de radiação do forno de craqueamento térmico de 1,2 – dicloroetano em CFD utilizando o software ANSYS CFX®;
- Comparar os modelos de aproximações de transferência de calor por radiação, utilizando os modelos: P-1, Rosseland, Transferência Discreta e Monte Carlo, visando à melhor compreensão de cada modelo;
- Validar os modelos simulados utilizando dados industriais;

### **3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA**

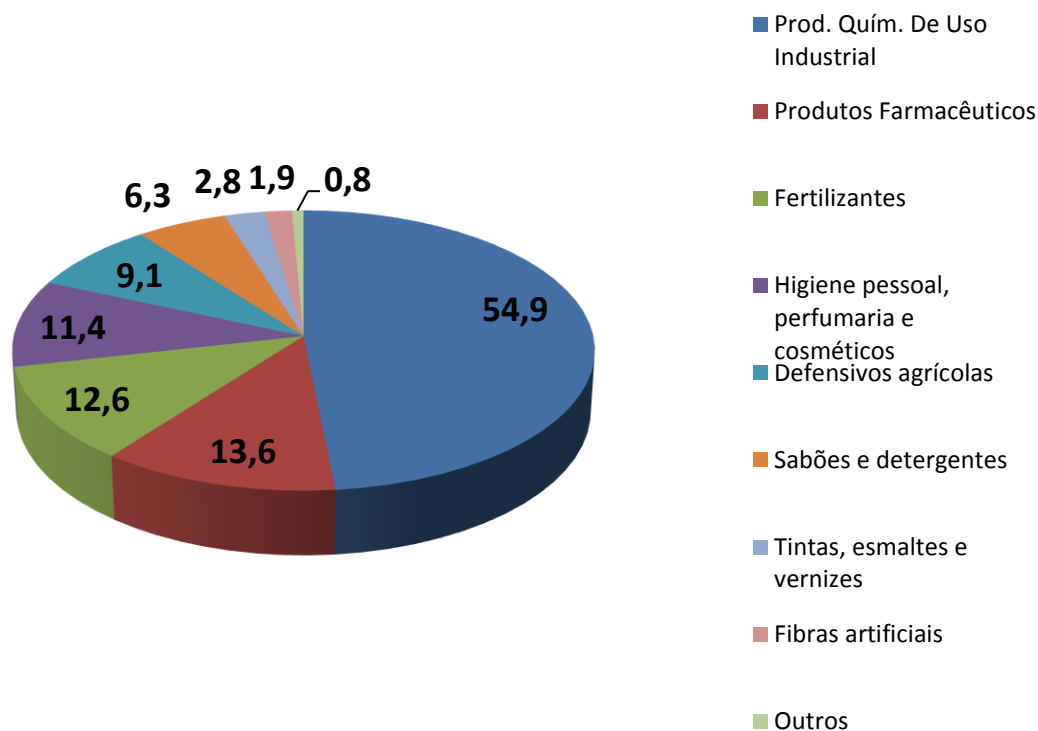
#### **3.1. Setor Petroquímico**

A indústria petroquímica congrega a indústria de produtos químicos derivados do petróleo. Especificamente, corresponde à parte da indústria química que utiliza como matéria prima à nafta, gás natural ou hidrocarbonetos básicos extraídos do solo. O setor é um dos pilares de um parque industrial moderno, em função de seu papel como fornecedor de insumos para uma grande diversidade de bens (ABIQUIM, 2018).

A petroquímica é o setor industrial de mais alto poder germinativo e mais alto relacionamento com os demais setores da vida econômica. Produz insumos para fertilizantes, plásticos, fibras, químicas, tintas, corantes, elastômeros, adesivos, solventes, tensoativos, gases industriais, detergentes, inseticidas, fungicidas, herbicidas, bernicidas, pesticidas, explosivos, produtos farmacêuticos, e outros. Seus produtos substituem com vantagem, a madeira, as fibras naturais, o aço, o papel, a borracha natural, entre outras. (ABIQUIM, 2018).

O setor da indústria química é um dos setores que tem maior participação no PIB industrial do Brasil. Em 2016 teve o faturamento líquido total de 113,5 bilhões de dólares, onde tem como destaque os produtos químicos de uso industrial que são os produtos oriundos da indústria petroquímica correspondendo 54,9 bilhões de dólares do faturamento total, como mostra o gráfico 1.1.1 (ABIQUIM,2018).

**Gráfico 3.1.1:** Faturamento da indústria química por segmento de 2016 em bilhões de dólares.



Fonte: ABIQUIM, 2018.

O setor petroquímico é organizado em três diferentes segmentos, cada um caracterizado pelo estágio de transformação de sua matéria-prima ou insumos. São eles: empresas de primeira geração, empresas de segunda geração e empresas de terceira geração (BRASKEM, 2016).

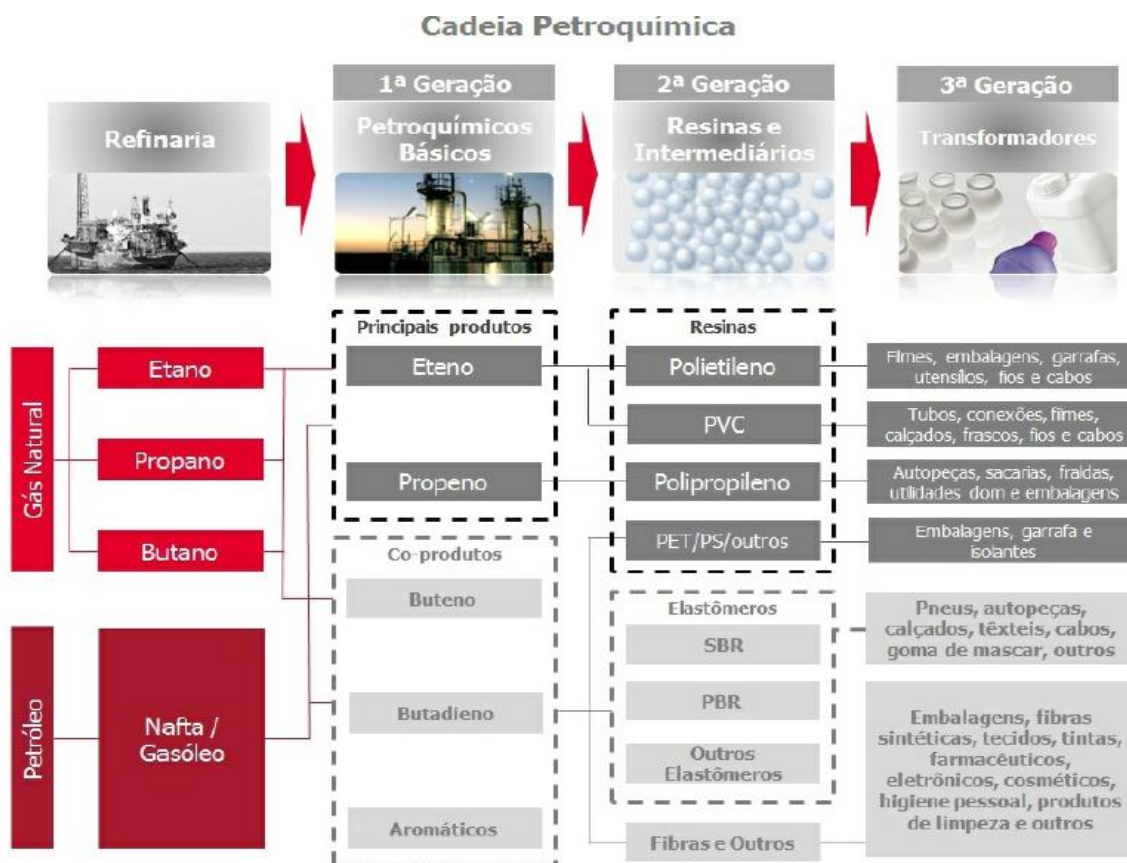
As empresas de primeira geração são as denominadas “craqueadoras”, as quais craqueam ou decompõem nafta, sua principal matéria-prima, em petroquímicos básicos: oleofinas (principalmente eteno, propeno e butadieno) e aromáticos. As empresas de segunda geração processam esses petroquímicos básicos para a produção dos intermediários: polietileno, EDC e PVC e as de terceira geração utilizam os petroquímicos intermediários e os transformam em seus produtos finais (BRASKEM, 2016).

No setor de segunda geração o craqueamento térmico de hidrocarbonetos é a melhor rota para produção de oleofinas e outros produtos do setor petroquímico. Dentro desses hidrocarbonetos encontra-se etileno e 1,2 – diclorometanos (EDC) que são as

matérias-primas fundamentais para produção de plásticos, particularmente o polietileno e o policloreto de vinila (PVC) (BRASKEM, 2016).

O segmento da terceira geração, denominados transformadores, compram os petroquímicos intermediários dos produtores de segunda geração e os transformam em produtos finais. Entre eles plásticos que são produzidos a partir de polietileno, polipropileno e PVC, fibras acrílicas que são produzidos a partir de acrilonitrila, nylon produzido a partir de fenol, eletrômeros produzidos a partir de butadieno, embalagens descartáveis produzidas a partir de poliestireno e polipropileno e entre outros bens de consumos e industriais (BRASKEM, 2016).

**Figura 3.1.1:** Cadeia petroquímica.



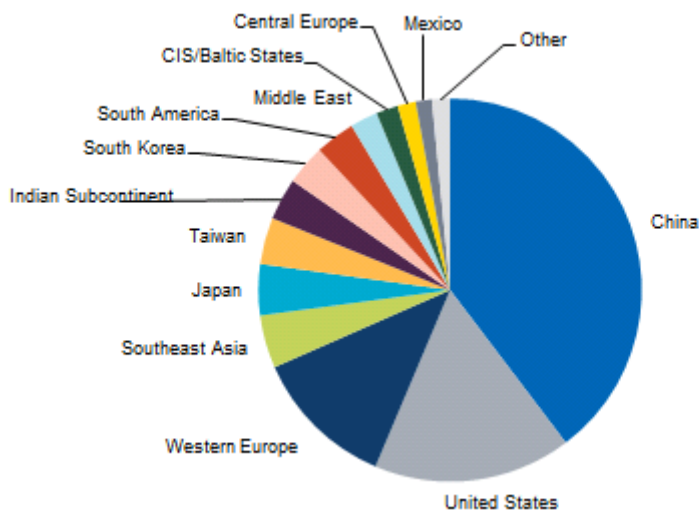
Fonte: Braskem, 2016.

### 3.2. Produção Mundial de MVC

Em 2016, o nordeste da Ásia foi o maior consumidor de MVC, respondendo por mais da metade da demanda mundial de MVC. A China é o maior participante global no mercado de MVC, com 43% da capacidade global total e cerca de 38% do total da produção global de 2016. A China também lidera o mercado mundial no consumo de

MVC, respondendo por 40% da demanda global em 2016; a demanda continuará crescendo 3,7% ao ano durante o período previsto até 2021. O segundo maior consumidor foi a América do Norte, representando 19% da demanda global, sendo os Estados Unidos o principal impulsionador da região (IHS, 2017).

**Figura 3.2.1:** Consumo mundial de MVC em 2016.



Fonte: IHS, 2017.

Mais de 99% do consumo global total de MVC em 2016 foi usado para produção de PVC. O MVC, portanto, segue muito de perto a tendência do mercado de PVC. A demanda por MVC deverá crescer a uma taxa média anual de cerca de 3% durante 2016–21 (IHS, 2017).

### 3.3. Processo de MVC

O processo em monocloreto de vinila (MVC) se dá a partir do craqueamento térmico da molécula de 1,2-dicloroetano (1,2-EDC), sendo que durante este processo endotérmico, a molécula MVC é formada pela remoção de um átomo de hidrogênio e outro de cloro da molécula de 1,2-EDC, que posteriormente se combinam para produzir também uma molécula de ácido clorídrico.

Além destes produtos, também ocorre reações paralelas onde são gerados subprodutos tais como cloropreno, benzeno e substâncias orgânicas com baixo número de átomos de hidrogênio (coque).

O coque, por sua vez, ao se depositar ao longo das serpentinas dos fornos de craqueamento é responsável pela elevação de pressão na carga destes equipamentos ou

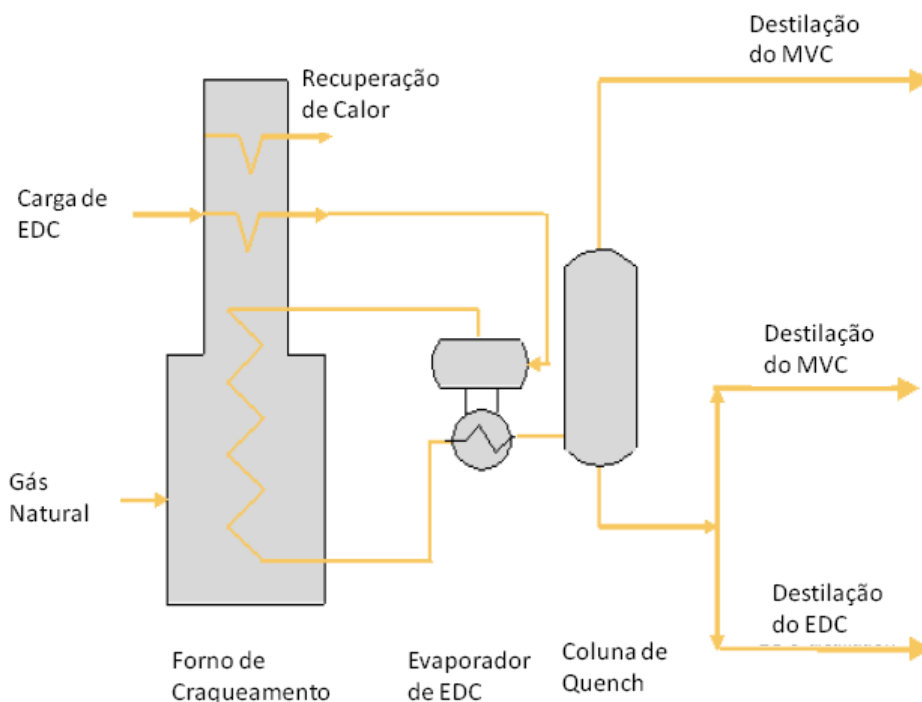
pela elevação pontual de temperatura. Estes dois parâmetros são cruciais na determinação da parada de operação dos fornos para a realização da operação de limpeza chamada de decoque.

A produção de monocloreto de vinila (MVC) se dá através do craqueamento térmico do EDC no interior de uma fornalha, com o fornecimento de calor, através da queima de gás combustível nos seus maçaricos.

Os fornos comerciais de EDC operam a uma pressão manométrica que varia de 1,4 a 3,0 MPa e a temperatura entre 475 e 550°C. A conversão de EDC por passe da serpentina é mantida entre 53 e 63%, com um tempo de residência variando de 2 a 30 segundos (OLIVEIRA JR, 2008).

Existem duas tecnologias distintas para o craqueamento do EDC: fornos de carga líquida e fornos de carga vaporizada. A primeira consiste em alimentar o EDC na serpentina do forno, sob a forma de líquido subresfriado, onde ele será aquecido, vaporizado e finalmente craqueado. Na segunda, o EDC é pré-aquecido e vaporizado em equipamento externo e só então é alimentado a um forno de pirólise. Comparando os fornos de carga líquida e vaporizada, verificamos que o último apresenta duas vantagens: operação a menor pressão e reduzida deposição de coque no interior das serpentinas. Seja vaporizado fora ou dentro das serpentinas, o EDC é aquecido até a temperatura reacional desejada no interior dos tubos da fornalha, onde ele se decompõe formando MVC e HCl (OLIVEIRA JR, 2008).

**Figura 3.3.1:** Unidade simplificada de um forno de craqueamento de 1,2-EDC.



Fonte: Site da Vinnolit ([http://www.vinnolit.de/vinnolit.nsf/id/DE\\_VinTec\\_EDC\\_Cracking\\_Process](http://www.vinnolit.de/vinnolit.nsf/id/DE_VinTec_EDC_Cracking_Process))

### 3.4. Processo de Craqueamento Térmico

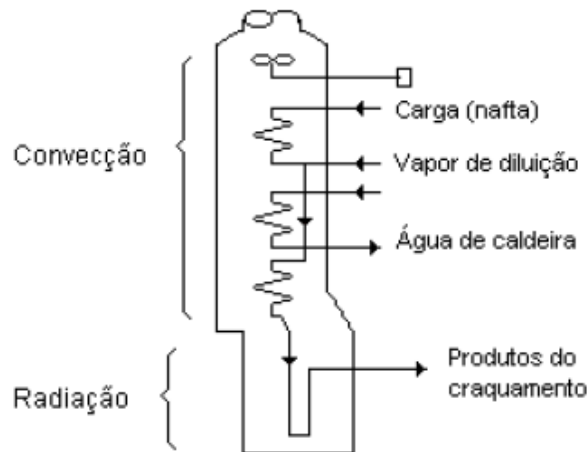
O processo de craqueamento térmico ou pirólise é a conversão de uma substância em outra por meio do uso de calor, isto é, pelo aquecimento da substância na ausência de ar ou oxigênio a temperaturas que podem chegar entre 450°C à 650°C (OLIVEIRA, 2014).

No craqueamento térmico é utilizado o forno ou fornalha como principal equipamento, com influência na eficiência do rendimento, seletividade para produtos importantes e consumo de energia no equipamento (QIAN, 2003).

Um forno é um equipamento que é utilizado em processos industriais para aquecer fluidos a serem processados a uma determinada temperatura utilizando combustíveis como fontes de energia. Os fornos mais modernos apresentam duas seções de aquecimento distintas: a seção radiante que recebe calor diretamente de uma chama e

uma seção convectiva que recebe calor dos gases de combustão que fluem através da chaminé (RAJAN, 2002).

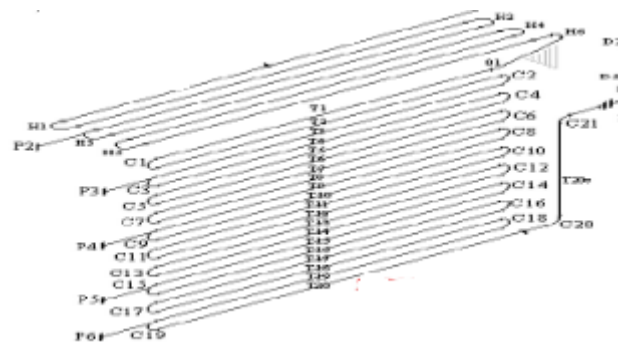
**Figura 3.4.1:** Forno de craqueamento térmico.



Fonte: AMORIM, 2007.

O arranjo geométrico para fornos de craqueamento é constituído por uma série de tubos retos dispostos paralelamente e unidos entre si por curvas. (OLIVEIRA, 2014)

**Figura 3.4.2:** Arranjo típico de forno de craqueamento.



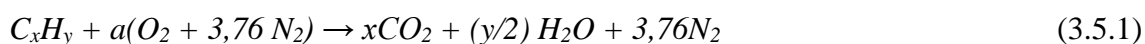
Fonte: OLIVEIRA, 2014.

### 3.5. Combustão de Hidrocarboneto

A combustão de hidrocarbonetos gera produtos como o vapor d'água e o dióxido de carbono, que são importantes na emissão e na absorção da energia radiativa. A energia nas chamas não é proveniente somente de gases, mas também da fuligem (partículas de carbono quente) e de material particulado em suspensão, como é o caso

na combustão de carvão pulverizado. Em câmaras de combustão a temperatura pode atingir a ordem de  $10^3$  K, o que torna o processo de transferência de calor de radiação térmica tão importante quanto demais mecanismos de transferência de calor (SIEGEL e HOWEL, 2002).

A relação estequiométrica da combustão do hidrocarboneto com ar é determinada por um simples balanço atômico supondo que o combustível reage para formar um conjunto ideal de produtos. Para um combustível hidrocarboneto dado pela fórmula química genérica  $C_xH_y$ , a relação estequiométrica pode ser expressa como mostra a equação 3.5.1. (TURNS, 2000)



### **3.6. Transferência de Calor**

A transferência de calor ou calor é definida como a energia térmica em trânsito devido a uma diferença de temperaturas no espaço, por isso quando existir uma diferença de temperatura em um meio ou entre meios, haverá, necessariamente, transferência de calor (INCROPERA, 2014).

#### *3.6.1 Radiação*

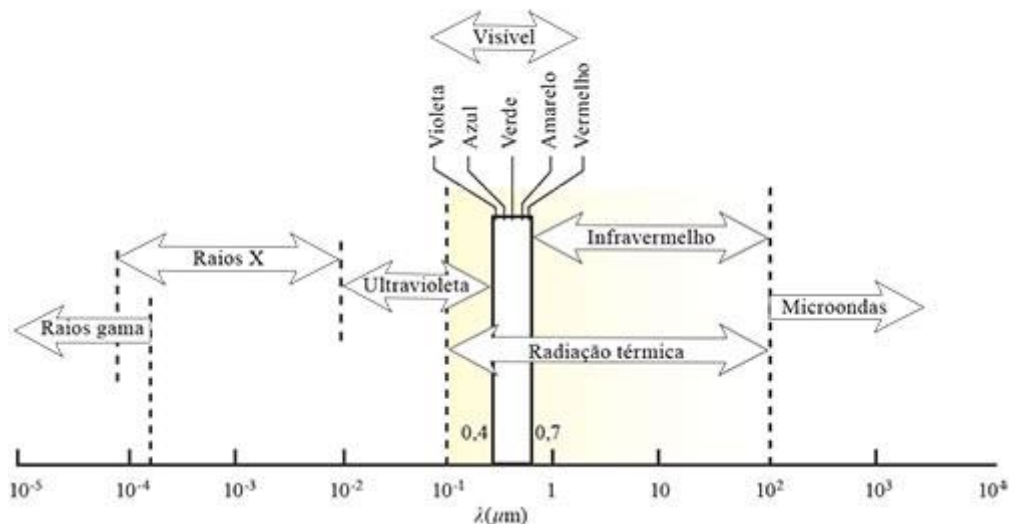
O processo pelo qual o calor é transferido de um corpo em função de sua temperatura, sem a intervenção de qualquer meio, é chamado radiação térmica. (KREITH, 2003).

Radiação térmica é a energia emitida pela matéria que se encontra a uma temperatura diferente de zero. Independentemente da forma da matéria, a emissão pode ser atribuída às mudanças nas configurações eletrônicas dos átomos ou moléculas que constituem a matéria. A energia do campo de radiação é transportada por ondas eletromagnéticas ou fótons. A transferência de energia por condução ou convecção requer a presença de um meio material, já a transferência por radiação ocorre mais efetivamente no vácuo (INCROPERA, 2014).

Dependendo dos diferentes comprimentos de ondas eletromagnéticas, cada um carrega quantidades de energia muito diferentes. Dependendo do seu comportamento ou ocorrência, as ondas eletromagnéticas foram agrupadas em várias categorias diferentes,

mostrado na Figura 3.6.1. Desse modo, a transferência de calor por radiação está entre os raios ultravioletas e radiação infravermelho (MODEST, 2003).

**Figura 3.6.1:** Espectro de onda eletromagnética.



Fonte: MODEST, 2003.

Em muitos problemas de engenharia, os líquidos podem ser considerados opacos para transferência de calor por radiação e gases podem ser considerados transparentes. Sólidos podem ser opacos, como é o caso dos metais, ou semitransparentes, como no caso de folhas de alguns polímeros e alguns materiais semicondutores.

### 3.7. Fluidodinâmica Computacional

#### 3.7.1. Definição

A fluidodinâmica computacional ou, também chamada de CFD (Computational Fluid Dynamics) é definida como um conjunto de ferramentas matemáticas baseadas na discretização de um problema físico de caráter de dinâmica dos fluidos, em equações diferenciais parciais (EDP) e solucionando-assimultaneamente para um dado sistema com o objetivo de se obter um estudo detalhado sobre os fenômenos de transportes envolvidos (OLIVEIRA, 2015).

De acordo com Souza (2009), são necessárias algumas informações acerca do sistema para que o mesmo possa ser representado numericamente por simulações. São elas:

- Volume de controle representado por uma geometria do problema: forma, tamanho, entradas e saídas do fluido;
- Propriedades dos fluidos: temperatura, pressão, massa específica, viscosidade, condutividade térmica, entre outras;
- Condições iniciais e condições de contorno para a resolução das equações diferenciais parciais envolvidas.

### 3.7.2. Histórico

Segundo Souza (2009), a evolução histórica da fluidodinâmica computacional é dividida em três fases distintas, dando início as décadas de 1950 e 1970 onde foi compreendida a primeira fase que deu a primeira solução numérica e os problemas de simples solução era o foco, o conhecimento era concentrado em universidades e softwares muito específicos, a segunda fase nos anos 1980 e 1990 foi marcada pelo aumento da capacidade de processamento dos computadores, maiores investimento da indústria e surgimento dos primeiros softwares comerciais e a terceira fase a partir dos anos 2000 é marcada pela preocupação de como unir e melhorar os modelos matemáticos existentes e aplicações de curto prazo e uso direto na indústria.

### 3.7.3. Etapas de simulação em CFD

Antes de iniciar a fazer a simulação de um processo que envolve CFD é preciso ter o volume de controle na forma de uma malha fluidodinâmica que representa esse processo em geometria.

Essa transformação do volume de controle em uma malha (grid) é chamada de discretização. A malha é subdividida em milhares de células menores, onde cada uma compreenderá as equações de transporte que regem o fenômeno físico ou químico observado. Através do método dos volumes finitos, o qual é utilizado em CFD, procura-se atribuir as equações no centro de cada célula e calcular os valores médios de seus parâmetros com base naquelas encontrados nas células vizinhas. O objetivo com o CFD é resolver todas essas equações de forma simultânea para cada célula da malha de maneira mais precisa e eficiente.

Existem inúmeros tipos de malhas: quadráticas, hexagonais, trigonais, tetraédricas ou híbridas e seus usos variam de acordo com a forma que apresenta o volume de controle.

Para a maioria dos softwares simuladores fluidodinâmicos atuais, para se chegar à solução do problema, é preciso passar por três etapas: pré-processamento, resolução e pós-processamento.

#### *3.7.3.1. Pré-processamento*

Nesta etapa é onde se define quais os fenômenos serão abordados, como transferência de calor, matéria e momento, o tipo de escoamento, monofásico ou multifásico, os fluidos e materiais envolvidos, assim como suas respectivas propriedades físicas, condições iniciais e de contorno, determinação de parâmetros de simulação e aspectos da simulação propriamente dita, como tempo de execução, número de iteração, tipo de erro empregado, etc. (MAITELLI, 2010).

#### *3.7.3.2. Resolução*

Etapa onde as equações diferenciais parciais (EDP) passam por um processo de discretização tornando-se equações algébricas, que são resolvidas em seguida na forma de um sistema linear matricial a partir de condições iniciais e de contorno (MAITELLI, 2010).

Essa é à base do Método dos Volumes Finitos (MVF), que consiste na divisão (ou discretização) de um domínio contínuo em pequenos elementos finitos que são, em geral, não estruturados na forma de triângulos ou quadriláteros quando em 2D e tetraedros e hexaedros quando em 3D formando uma malha ou grade. Apesar dessa divisão, as propriedades dos elementos em suas posições continuam idênticas em cada ponto correspondente àquelas encontradas na geometria não-particionada. Essa é, inclusive, uma das vantagens desse método, de lidar com vários tipos de geometrias, inclusive complexas (GONÇALVES, 2007). A malha define apenas as fronteiras do volume de controle global, não sendo necessariamente relacionada a um sistema de coordenadas.

O MVF utiliza a forma integral das equações de conservação como ponto de partida e, após a divisão dos volumes finitos do domínio, são inseridas neles tais equações e então cada variável é calculada no centroide de cada volume de controle. Os valores que se encontram nas faces desses volumes são determinados por interpolação.

As equações de conservação aplicadas irão formar um sistema de equações diferenciais parciais que para serem resolvidas precisam de linearização seguida da aplicação de um método de resolução matricial. Para linearizá-las, as equações são integradas no tempo e espaço, possibilitando arranjo em um sistema linear.

### 3.7.3.3. Pós-processamento

É quando se decide a forma de mostrar os resultados e serão visualizados. Geralmente os softwares mais atuais de CFD apresentam opções gráficas avançadas, em 2D e 3D, bem como a possibilidade de inserção de animações e manipulações no volume de controle (MAITELLI, 2010).

## 3.8. Modelos matemáticos de CFD

### 3.8.1. Equações de conservações

As equações de conservação têm por base os princípios físicos e são divididas em massa, quantidade de movimento e energia, onde são o ponto de partida para descrição do movimento dos fluidos e sua distribuição interna de energia.

Essas equações são discretizadas, e originam volumes infinitesimais, que tem as leis de conservação garantidas no seu domínio. Partindo de um volume infinitesimal, percebe-se que ele será função do tempo e do espaço, sofrendo alterações e mudando sua forma à medida que se desloca. Generalizando, pode-se creditar a convecção e a difusão, o domínio do movimento de um fluido em um escoamento. Denomina-se convecção ao processo de deslocamento e o processo de difusão (NAVARRO, 2011).

#### 3.8.1.1. Conservação de massa

A equação que representa a conservação de massa, também conhecida como equação da continuidade, pode ser obtida analisando a taxa mássica de escoamento que entra e sai de um determinado elemento infinitesimal de volume. Desta forma, o acréscimo ou decréscimo temporal da massa específica neste volume é controlado pelo transporte convectivo de massa sobre as fronteiras deste volume de controle (BASTOS, 2005).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U) = 0 \quad (3.8.1)$$

### 3.8.1.2. Conservação de movimento

A equação que representa a taxa de variação temporal de momento do fluido é igual à resultante das forças que atuam sobre o fluido. O 1º termo do lado esquerdo representa a variação em função do tempo, já o 2º termo representa a transferência de quantidade de movimento do fluido devido ao fluxo do fluido (transporte convectivo). O 1º termo do lado direito da equação representa o divergente de contribuição da pressão. O 2º termo diz respeito à transferência de quantidade de movimento de forma molecular (transporte difusivo). E o último termo representa um termo fonte, que inclui contribuição devido às forças do corpo somente (BINELI, 2009).

$$\frac{\partial(\rho U)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U \otimes U) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + S_M \quad (3.8.2)$$

### 3.8.1.3. Conservação de energia

A equação total de energia é a equação de governamental completa para os fluidos, sem simplificações. Adotada para escoamentos com velocidade alta (ANSYS, 2016).

$$\frac{\partial(\rho h_{tot})}{\partial t} - \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U h_{tot}) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \nabla \cdot (U \cdot \tau) + U \cdot S_M + S_E \quad (3.8.3)$$

Onde,

$h_{tot}$  é a entalpia total.

$\nabla \cdot (U \cdot \tau)$  é o termo de trabalho viscoso.

$U \cdot S_M$  é o trabalho devido as fontes externas de momentum.

$U$  é a grandeza de velocidade

$T$  é a temperatura

$S_E$  é a fonte de energia

$\lambda$  é a condutividade térmica

$\rho$  é a densidade

A Equação 3.8.3 informa que a taxa de variação temporal da energia é igual à soma do fluxo líquido, ou resultante, de calor para o fluido com o trabalho realizado sobre o fluido. O 1º termo do lado esquerdo da equação representa a taxa de mudança

no tempo da densidade multiplicada pela entalpia. O 2º termo relaciona a taxa de mudança no tempo da pressão. O 3º termo descreve o fluxo de energia fora do elemento. O 2º termo do lado direito diz respeito ao trabalho devido às forças viscosas (trabalho da viscosidade). O 3º termo representa o trabalho devido à fonte de quantidade de movimento externo. E o último termo diz respeito a uma, possível, fonte de energia (BINELI, 2009).

### 3.8.2. Modelo de turbulência

Pode-se definir como turbulência, o aparecimento de instabilidades num escoamento originalmente estável, as quais se multiplicam por um processo não-linear e regeneram-se finalmente em um regime turbulento. A turbulência é um fator importantíssimo no processo de mistura das espécies químicas, como também na transferência de calor, sendo caracterizada pelos tensores de Reynolds na fase contínua (BASTOS, 2005).

#### 3.8.2.1. Modelo k-ε

Trata-se do modelo mais utilizado para caracterizar a turbulência, devido principalmente a grande representatividade de fenômenos e o menor esforço computacional. O modelo k-ε é baseado em duas equações, uma associada às escalas de velocidade e outra às escalas de comprimento, na qual cada uma delas possui uma equação de transporte (DIAS, 2009).

A equação da continuidade, Equação 3.8.2, é modificada para o modelo k-ε e torna-se:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_i U_j) = -\frac{\partial p'}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_{eff} \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \right] + S_M \quad (3.8.4)$$

Onde,

$\mu_{eff}$  é a viscosidade efetiva para turbulência;

$S_M$  é a soma das forças no corpo;

U é a grandeza de velocidade;

$p'$  é a pressão;

$\rho$  é a densidade.

O modelo k-ε é baseado no conceito da viscosidade de Eddy, de modo que (ANSYS, 2016):

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \quad (3.8.5)$$

Onde,

$\mu_t$  é a viscosidade turbulenta.

O modelo k-ε assume que a viscosidade turbulenta é ligada à energia cinética e dissipação turbulenta pela relação:

$$\mu_t = C_\mu \rho \left( \frac{k^2}{\varepsilon} \right) \quad (3.8.6)$$

Onde,

k é a energia cinética turbulenta;

ε é a taxa de dissipação turbulenta;

$C_\mu$  é uma constante do modelo turbulento k-ε;

ρ é a densidade.

Os valores de k e ε vem diretamente das equações diferenciais de transporte para a energia cinética turbulenta e taxa de dissipação turbulenta (TELEKEN, 2009). Dessa forma, em sistemas multifásicos teremos:

- Equação k

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \rho \varepsilon + P_{kb} \quad (3.8.7)$$

- Equação ε

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon + C_{\varepsilon 1} P_{sb}) \quad (3.8.8)$$

Onde, os termos adicionais  $P_{kb}$  e  $P_{sb}$  representam a influência das forças de flutuações, respectivamente, e  $C_{\varepsilon 1}$ ,  $C_{\varepsilon 2}$ ,  $C_\mu$ ,  $\sigma_k$  e  $\sigma_\varepsilon$  são constantes do modelo.

A variável  $P_k$  é a turbulência devido às forças viscosas que é modelado usando:

$$P_k = \mu_t \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \left( 3\mu_t \frac{\partial U_k}{\partial x_k} + \rho k \right) \quad (3.8.9)$$

Onde,

$k$  é a energia cinética turbulenta;

$\mu_t$  é a viscosidade turbulenta;

$\rho$  é a densidade;

$U$  é a grandeza de velocidade;

A Tabela 3.8.1 apresenta os valores das constantes empíricas do modelo k-ε padrão.

**Tabela 3.8.1:** Valores das constantes empíricas do modelo k-ε padrão.

Constante	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$C_{\mu}$	$\sigma_k$	$\sigma_{\varepsilon}$
Valor	0,09	1,44	1,92	1,00	1,30

Fonte: TELEKEN,2009.

### 3.8.3. Modelo de Combustão

A altíssima velocidade de reação é uma das melhores formas de caracterizar o processo de combustão, ocasionando vantagens e desvantagens a esse processo. Como desvantagem podemos citar a inviabilidade do emprego da equação cinética de reação, já como vantagem, é possível simplificar os modelos partindo de que as reações sejam instantâneas, assim elas seriam regidas apenas pela taxa de mistura entre os reagentes (ALENCAR, 2007).

Como análise fundamental para simulação de combustão, se faz necessário a análise de um determinado parâmetro, que seria a relação entre a velocidade característica do processo químico e a velocidade característica do processo de mistura turbulento (PINHEIRO JR, 2010). Dessa forma, para um processo químico muito rápido, a combustão seria controlada pelo processo de mistura turbulento e as condições estequiométricas, já para velocidade do processo químico baixa, a combustão seria governada pela velocidade de reação (PINHEIRO, 2010). Para isso, utiliza-se um

número adimensional que permite comparar o tempo de processo químico, ( $t_Q$ ) e de mistura turbulenta, ( $t_T$ ). Esse número é conhecido como Damköhler ( $Da$ ):

$$Da = \frac{t_T}{t_Q} \quad (3.8.10)$$

Assim, a condição de cinética química extremamente veloz corresponde a uma condição tal que  $Da \gg 1$ ; enquanto que  $Da \ll 1$  representa uma condição governada essencialmente pela cinética química (PINHEIRO JR, 2010).

### 3.8.3.1. Eddy-Dissipation

O modelo Eddy-Dissipation é baseado no conceito de que a reação química é tão rápida, relativo ao processo de transporte no fluxo. Dessa forma, à medida que se mistura os reagentes, a nível molecular, eles instantaneamente formam produtos. O modelo assume que a taxa de reação pode ser diretamente relacionada com o tempo necessário para misturar reagentes ao nível molecular (ANSYS, 2016). Em escoamentos turbulentos, este tempo de mistura é dominado pelas propriedades de Eddy e, por conseguinte, a taxa é proporcional a um tempo de mistura definida pela energia cinética turbulenta,  $k$  e dissipação,  $\varepsilon$ :

$$Taxa \propto \frac{\varepsilon}{k} \quad (3.8.11)$$

Este conceito de controle de reação é aplicável em muitos problemas industriais onde as taxas de reação de combustão são rápidas em comparação com as taxas de mistura de reagentes (ANSYS, 2016). No modelo de dissipação de Eddy-Dissipation, a taxa de progresso de reação elementar  $k$ , é determinada pelas duas expressões seguintes:

$$R_k = A \frac{\varepsilon}{k} \min \left( \frac{[I]}{v'_{kl}} \right) \quad (3.8.12)$$

Em que  $[I]$  representa a concentração molar do componente I, incluindo apenas os reagentes (ANSYS, 2016).

$$R_k = AB \frac{\varepsilon}{k} \left( \frac{\sum_p (I) W_I}{\sum_p v'_{kl} W_I} \right) \quad (3.8.13)$$

Onde, P faz um loop sobre todos os componentes do produto na reação elementar k (ANSYS, 2016).

#### 3.8.4. Modelos de Radiação

Em fornos e câmaras de combustão, a radiação térmica é um dos mecanismos mais importantes de transferência de calor. Ela se dá devido ao fato que toda superfície que possui temperatura maior que o zero Kelvin emite radiação na forma de ondas eletromagnéticas, dessa forma não necessita de um meio para se propagar, ou seja, se propaga até no vácuo (DONOSO, 2008). A lei que rege a transferência de calor por radiação é a Lei de Radiação de Stefan-Boltzmann para o corpo negro.

$$q = \sigma \cdot \varepsilon \cdot T^4 \quad (3.8.14)$$

Onde  $\sigma$  é a constante de Stefan-Boltzmann e é igual a  $3.6705119 \cdot 10^{-8} \text{W/m}^2 \cdot \text{K}^4$ ;  $\varepsilon$  é a emissividade do meio; e T é a temperatura absoluta do meio ou superfície quente (ALENCAR, 2007).

O objetivo da modelagem de radiação é resolver a equação de transporte de radiação, obter o termo fonte,  $S_E$ , para a equação de energia, Equação (3.8.3), e o fluxo de calor radiativo nas paredes, entre outras quantidades de interesse. Deve-se restringir a processos de radiação independentes do tempo. Isto é normalmente uma aproximação muito boa de situações a ser cumprido em aplicações industriais porque a variável de tempo para a radiação chegar ao equilíbrio local é muito curta e as temperaturas são relativamente baixas (ANSYS, 2016).

A equação de transporte da radiação espectral pode ser escrita como (BEER *et al.*, 1971 e CHUNG, 2002):

$$\frac{dI_\nu(r, s)}{ds} = \left( - (K_{av} + K_{sv}) I_\nu(r, s) + K_{av} I_b(\nu, T) + \frac{K_{sv}}{4\pi} \int_{4\pi} dI_\nu(r, s') \phi(s \cdot s') d\Omega' + S \right) \quad (3.8.15)$$

Onde:

$\nu$  é a frequência

r é o vetor posição

s é o vetor direção

$K_a$  é o coeficiente de absorção

$K_s$  é o coeficiente de dispersão

$I_b$  é a intensidade de emissão do corpo negro

$I_v$  é a intensidade de radiação espectral

$T$  é a temperatura

$\Omega$  é o ângulo do sólido

$\Phi$  é a função de fase de dispersão

$S$  é o termo da fonte de intensidade de radiação

Sendo assim para se modelar a radiação térmica, se faz necessário obter o volume total de absorção e emissão de radiação térmica, seguindo o procedimento (ALENCAR, 2007):

a) resolver a Equação de Transporte da Radiação Espectral (RTE), Equação 3.8.15;

b) obter o termo de geração interna de calor da equação de conservação de energia;

c) estimar os fluxos de calor das paredes.

A transferência de calor por radiação é um fenômeno complexo, devido à quantidade de variáveis envolvidas. Desta forma, existem diferentes modelos de radiação normalmente utilizados no CFD que são os seguintes: Modelo P1; Modelo Rosseland; Modelo de Transferência Discreta e Modelo de Monte Carlo (ALENCAR, 2007).

#### 3.8.4.1. Modelo P1

O modelo P-1 ou aproximação diferencial é baseado na simplificação da equação de transporte da radiação, assumindo que a intensidade de radiação é isotrópica, dessa forma se adiciona uma equação de transporte, ocasionando um maior custo computacional (ANSYS, 2016). Além disso, tratam como limites transparentes entradas, saídas e aberturas, dessa forma, toda a energia de saída é absorvida, e a

energia de entrada é calculada como um corpo negro em cada local (ANSYS, 2016). O espectro radiativo de fluxo de calor é dado por:

$$q_{rv} = -\frac{1}{3(K_{av} - K_{sv}) - AK_{sv}} \nabla G_v \quad (3.7.16)$$

Onde,  $G_v$  é a radiação espectral incidente, dada por (RONCHETTI, 2008):

$$G_v = \int I_v d\Omega_s \quad (3.8.17)$$

O espectro da radiação incidente resulta da substituição da Equação 3.8.14 na equação de transporte de radiação, sendo escrita na seguinte forma (VENSON, 2007):

$$-\nabla \left( \frac{1}{3(K_{av} - K_{sv}) - AK_{sv}} \right) \nabla G_v = K_{av} (E_{bv} - G_v) \quad (3.8.18)$$

#### 3.8.4.2. Modelo de Rosseland

Pode-se classificar o modelo de Rosseland como uma simplificação da Equação de Transporte Radiativa para o caso de meios óticos espessos. A aproximação Rosseland assume que a mídia é opticamente espessa e que a energia radiante emitida a partir de outros locais no domínio são rapidamente absorvidas e não têm influência no transporte local. Isto implica que a aproximação não é válida perto das paredes. Introduz um novo termo de difusão na equação de energia original, com um coeficiente de difusão fortemente dependente da temperatura (RONCHETTI, 2008). O fluxo radiativo total em um meio opticamente espesso, e linearmente espalhante, pode ser escrito:

$$q_r = -\int \frac{4}{3\beta - CK_s} \nabla E_{bv} dv \quad (3.8.19)$$

Onde  $\beta$  é o coeficiente de extinção, absorção mais espalhamento (ANSYS, 2016).

Quando a aproximação de Rosseland é introduzida na equação de transporte da energia, a condução e o fluxo radiativo podem ainda ser combinados da seguinte forma:

$$q = q_c + q_r \therefore -(\lambda + \lambda_r) \nabla T \quad (3.8.20)$$

Tendo:

$$\lambda_r = -\frac{16\sigma n^2 T^3}{3\beta} \quad (3.8.21)$$

Onde  $\lambda$  é a condutividade térmica e  $\lambda_r$  é a condutividade radiativa total (RONCHETTI, 2008).

### 3.8.4.3. Modelo de Discrete Transfer (DTM)

O modelo parte do princípio que a absorção e a emissão podem aumentar ou diminuir o fluxo de calor por radiação que atravessa um meio participante (OZISIK, 1990). Segundo Silva (2005) a principal consideração do DTM é que a radiação que parte de uma superfície discreta numa certa faixa de ângulos de sólidos pode ser aproximada por uma única direção. Ou seja, é preciso prever com suficiente precisão a transferência de calor entre superfícies, sem utilizar o cálculo do fator de forma. O DTM também assume que todas são difusas. Isto significa que a reflexão da radiação incidente sobre uma superfície é isotrópica com relação ao ângulo do sólido (SILVA, 2005). Dessa forma, pode-se adotar que a transferência de radiação se realiza num meio isotrópico, dando origem a expressão:

$$\frac{dI_v(r, s)}{ds} = -(K_{av} + K_{sv}) \cdot I_v(r, s) + K_a \cdot I_b(v, T) + \frac{K_{sv}}{4\pi} \cdot \int_{4\pi} I_v(r, s') \cdot d\Omega + S \quad (3.8.22)$$

Assumindo que o meio seja homogêneo, tem-se:

$$I_v \approx I_v(r + dr) \quad (3.8.23)$$

$$q_v^R(r) \propto q_v^R(r + dr) \quad (3.8.24)$$

Sendo assim, o modelo permite calcular a radiação  $I_v$  ao longo de raios saindo das paredes pela expressão:

$$I_v(r, s) = I_{v0} \cdot \exp[-(K_{av} + K_{sv}) \cdot s] + I_{bv} \cdot [1 - \exp(-K_a - s)] + K_{sv} \cdot \vec{I}_v \quad (3.8.25)$$

Tendo que  $I_{v0}$  é a intensidade da radiação saindo da parede;  $I_v$  é a intensidade média da radiação no meio;  $I_{bv}$  é a intensidade da radiação devida ao corpo negro; e  $s$  é a variável equivalente ao tempo, quando se aplica a Transformada de Laplace (ALENCAR, 2007).

#### 3.8.4.4. *Modelo de Monte Carlo*

O modelo de Monte Carlo assume que a intensidade de radiação é proporcional ao diferencial de fluxo angular para os fótons e no campo de radiação como um fóton de gás. Para este gás, é a probabilidade por comprimento de unidade que um fóton é absorvido em uma determinada frequência. Portanto, a intensidade média da radiação, é proporcional à distância percorrida por um fóton no volume da unidade em unidade de tempo (ANSYS, 2013).

A transferência de calor por radiação pelo modelo Monte Carlo calcula o erro de desvio padrão com base nas estatísticas de Poisson. O número de histórico especificado pelo usuário é dividido em vários grupos. As histórias são selecionadas de cada grupo e suas interações físicas (emissão, absorção, reflexão, etc.) são rastreados através do domínio. No final do cálculo, cada grupo fornece valores para as quantidades de interesse, como fluxo de calor de irradiação ou radiação absorvida. O valor médio e o desvio padrão de cada quantidade de interesse são calculados a partir dos grupos. Um desvio padrão normalizado é calculado dividindo-se o desvio padrão pelo valor médio (BEZERRA, 2014).

#### 4. ESTADO DA ARTE

Hu *et al.* (2012) estudaram um forno industrial de craqueamento térmico de nafta, fornalha e reator. Na fornalha foi utilizado técnicas de CFD, usando o software comercial Fluent, onde em sua modelagem adotou o método de ordenadas discretas (DOM) para resolver a equação de transferência de radiação (RTE). O escoamento adotado foi o escoamento turbulento, através do modelo padrão k- $\epsilon$  e teve como substâncias para a combustão uma mistura de metano, hidrogênio e ar, a solução da combustão foi dada pelo modelo Finite Rate/Eddy-Dissipation. A malha foi gerada apenas em um segmento da geometria do forno, utilizando uma malha híbrida com formato tetraédrico, queimadores e reator, e hexaédrico, restante do forno, dando um número total de elementos de aproximadamente de 200 mil, obtendo resultados como o fluxo de calor, a combustão do combustível e radiação emitida pela a transferência de calor do forno. Também foi possível quantificar as temperaturas de saída da combustão e da superfície do reator e as concentrações dos gases, onde foi possível comparar com dados industriais, encontrando erros relativos menores que 1%.

Hassan *et al.* (2013) desenvolveram um estudo utilizando cinco diferentes modelos de combustão: modelo de chama laminar não-estacionário com detalhamento GRI2.11 (USLF-GRI2.11), função densidade de probabilidade (PDF), modelo do conceito Eddy-Dissipation (EDC), modelo de chama laminar estacionário com detalhamento GRI2.11 (SLF-GRI2.11) e modelo do conceito Eddy-Dissipation com detalhamento GRI2.11 (EDC-GRI2.11). Para seu mecanismo de reação, a solução da equação de radiação RTE foi calculada através do método DOM e o escoamento foi simulado pelo modelo padrão k- $\epsilon$  em um forno de craqueamento térmico, utilizando CFD como ferramenta, através do software comercial Fluent. A geometria do forno foi baseada em um forno de craqueamento de etileno, onde houve um detalhamento da geometria em seus queimadores visando à obtenção dos resultados para concentrações de  $\text{CO}_2$  e  $\text{O}_2$ . A temperatura da chama, foi também comparada com dados industriais onde foi possível comparar com os modelos, tendo como destaque o modelo de combustão EDC-GRI2.11 por sua precisão na formação dos seus produtos da combustão, dando a mesma concentração de  $\text{CO}_2$  e  $\text{O}_2$  com os dados industriais.

Li *et al.* (2015) estudaram um forno a vácuo de refinamento, onde foi utilizado técnicas de CFD, usando o software comercial CFX, a modelagem adotada foi o modelo

de transferência discreta (DTM) para resolver a equação de transferência de radiação (RTE), o escoamento utilizado foi o escoamento turbulento, através do modelo padrão k- $\epsilon$  e teve como combustível o metano, a solução da combustão foi dada pelo modelo Finite Rate/Eddy-Dissipation. Para a malha gerada no forno, onde houve um detalhamento nos queimadores, foi utilizada uma malha não-estruturada, dando um número total de elementos de aproximadamente de 7 milhões, obtendo resultados como o fluxo de calor, a combustão do combustível e radiação emitida pela a transferência de calor do forno. Também foi possível quantificar as temperaturas de saída da combustão, onde foi possível comparar com dados industriais, encontrado erros relativos menores que 1%.

Hu *et al.* (2015) trabalharam no desenvolvimento de um estudo sobre o impacto de três diferentes modelos de radiação, P1, modelo ordenadas discretas (DOM) e modelo transferência discreta (DTM). O escoamento adotado foi o escoamento turbulento, através do modelo padrão k- $\epsilon$  e a combustão foi simulada através do modelo função densidade de probabilidade (PDF), tendo como seu combustível uma mistura de metano, etano, hidrogênio e CO, na simulação do conjunto de um forno de craqueamento térmico de nafta utilizando a ferramenta de CFD, através do software comercial Fluent. A malha utilizada no trabalho foi híbrida com formato tetraédrico, queimadores e reator, e hexaédrico, restante do forno, dando um número total de elementos de aproximadamente de 4 milhões. Os resultados obtidos concluíram que o melhor desempenho foi para o modelo DOM, quando comparado com dados industriais, isso dando erro relativo de temperatura da saída dos gases combustíveis e temperatura da superfície do reator menor que 1 %.

Huet *al.* (2016) desenvolveu um estudo na seção convecção, de forno industrial de craqueamento de etileno utilizando CFD, o software comercial utilizado foi o Fluent . Na seção de convecção foi utilizado o modelo turbulento k- $\epsilon$  e para gerar a transferência de calor por radiação da seção de radiação foi utilizado o modelo de radiação ordenadas discretas (DOM), onde foi possível obter o fluxo de calor, o fluxo do escoamento dos gases formados e os perfis de temperatura do forno. A malha utilizada no trabalho foi não-estruturada hexaédrica, dando um número total de elementos de aproximadamente de 2 milhões. Os resultados de temperaturas foram comparados com dados industriais, onde obteve-se erros relativos menores que 1%, dando ótimo rendimento para a simulação.

Fang, Qiu e Zhou (2017) estudaram a simulação conjunta da zona de radiação e o reator tubular de um forno de craqueamento de nafta, onde comparou uma modelagem própria em linguagem C++, utilizando o método de zona para simular os fenômenos de radiação, combustão e escoamento, com a técnica de CFD, utilizou como software comercial Fluent, onde em sua modelagem adotou o método de ordenadas discretas (DOM) para resolver a equação de transferência de radiação (RTE). O escoamento adotado foi o escoamento turbulento, através do modelo padrão k- $\epsilon$  e adotou como modelo o Finite Rate/Eddy-Dissipationa fim de detalhar os mecânicos cinéticos da reação química de nafta ao longo do reator, o escoamento existente no forno e no reator e além, dos perfis temperaturas do forno. Os resultados obtidos foram que a modelagem própria obteve melhores resultados de temperatura, pressão e concentrações dos produtos, dando erros relativos menores e um tempo de processamento muito menor do a simulação utilizando a técnica de CFD, porém a técnica de CFD demonstra um resultado visual do sistema em estudo.

Vandewalle *et al.* (2017) desenvolveram um estudo através da simulação dinâmica em CFD de um reator tubular do forno de craqueamento térmico de propano, usando o software comercial OpenFOAM<sup>®</sup>, onde em sua modelagem adotou o escoamento turbulento, através do modelo padrão k- $\omega$  e a cinética química foi utilizada através do modelo CRACKSIM, obtendo resultado da decomposição de coque na tubulação do reator tubular e também a conversão de propano ao logo da campanha do forno.

Oliveira *et al.* (2017) estudaram a simulação CFD no reator tubular industrial de craqueamento térmico de 1,2-dicloroetano utilizando o software comercial CFX, com uma malha hexaédrica, dando um número total de elementos aproximadamente de 1 milhão, onde foi possível obter a reação química e o escoamento da reação de MVC, além da distribuição de calor existente na reação ao longo do reator. Os resultados de temperatura, composição de EDC e pressão foram comparados com dados de campo e foram encontrados os mesmos resultados de entrada e saída do reator, com isso prevendo um comportamento dessas variáveis estudadas ao longo do reator tubular.

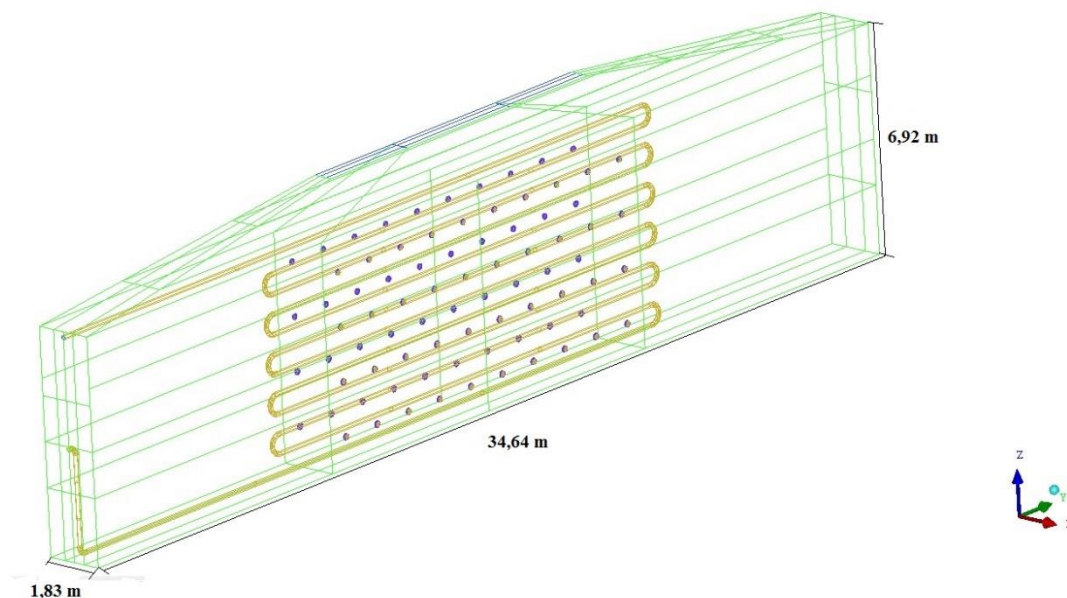
## 5. METODOLOGIA

As simulações em CFD foram realizadas no simulador da ANSYS CFX<sup>®</sup> na versão 13.0, onde a geometria e malha foram geradas no pacote ANSYS ICEM CFD<sup>®</sup> na versão 13.0, com uso das equações de conservações e modelos de turbulência, combustão e radiação. O conhecimento das condições operacionais do forno de craqueamento térmico de 1,2-dicloroetano permitiu que as simulações fossem realizadas e estudas os seguintes itens: as influências do número total de elementos das malhas geradas com relação à temperatura do forno, dos modelos de radiação para a solução da equação RTE com relação aos dados de campo na parede do tubo do reator e a visualização qualitativa das variáveis de temperatura, intensidade de radiação, velocidades e composição do produto da combustão.

### 5.1. Estudo de caso

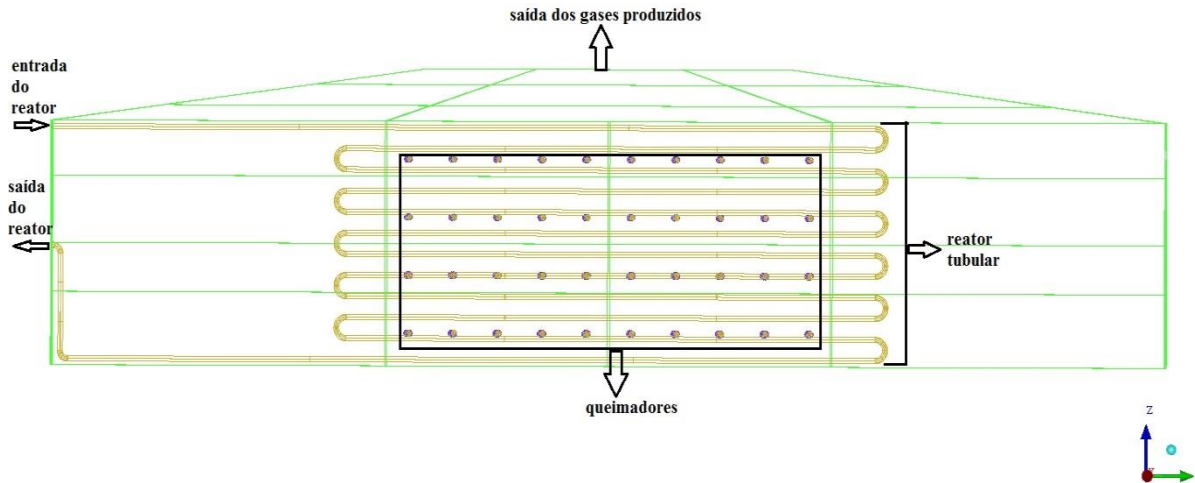
O trabalho envolveu a modelagem fluidodinâmica da câmara de radiação de um forno de 1,2 – Dicloroetano industrial e a partir dos dados de projeto, foi desenvolvido o modelo do forno de craqueamento em 3D no software comercial ANSYS<sup>®</sup>, ICEM CFD versão 13.0, conforme as Figuras 5.1.1 e 5.1.2.

**Figura 5.1.1:** Geometria do forno de craqueamento térmico.



A Figura 5.1.1 é a representação em 3D no software do forno de craqueamento térmico de 1,2-dicloroetano com suas dimensões, comprimento de 34,64 m, largura 1,83 m e altura de 6,92 m.

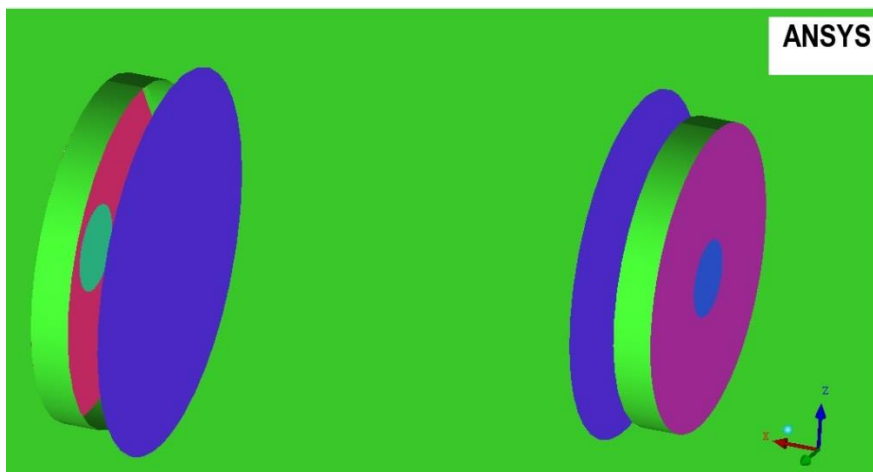
**Figura 5.1.2:** Arranjo do forno de craqueamento térmico.



A Figura 5.1.2 apresenta o arranjo do forno de craqueamento térmico de 1,2-dicloroetano, onde usou-se, em seu centro, 10 queimadores alinhados em 4 fileiras em cada lado do forno. Internamente representou-se o reator tubular, onde sua entrada de produto se dá pelo topo e sua saída na base do equipamento, fazendo curvas.

No desenvolvimento da geometria do forno de craqueamento térmico não se considerou o detalhamento exato dos queimadores, pois a complexidade da geometria em muito aumentaria o esforço computacional inviabilizando a simulação devido a limitações de hardware.

**Figura 5.1.3:** Geometria dos queimadores.



A Figura 5.1.3 mostra a geometria dos queimadores, onde foram adotados queimadores como sendo duas tubulações inseridas internamente com uma chapa na frente da tubulação.

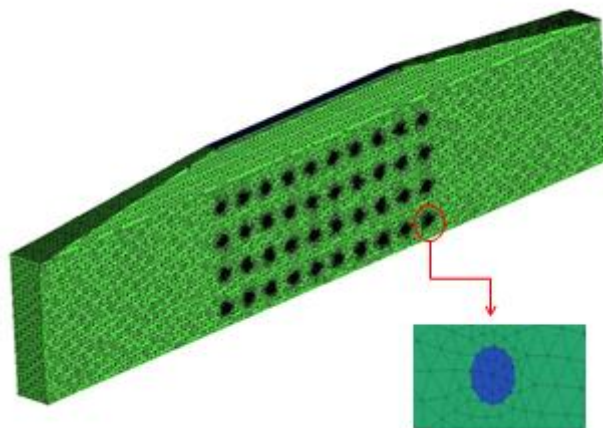
## 5.2. Geração de malha

A malha foi gerada no pacote comercial da ANSYS®, ICEM CFD versão 13.0, que é um pacote com vasta opção de criação e gerenciamento de geometrias estruturadas e não-estruturadas a partir de comandos de gênese de pontos, linhas e superfícies.

A malha foi definida como não-estruturada com o formato tetraédrico por ter uma melhor adequação nas superfícies não uniformes e também por não demandar um esforço computacional grande. (ÇENGEL E CIMBALA, 2012)

Portanto, com a geometria definida, deu-se início a geração de malha, através do comando de criação de malha não estruturada tetraédrica que se baseia no tamanho e distribuição dos elementos pela geometria em cada parte (forno, queimadores, reator). O tamanho dos elementos na região dos queimadores e reator foram reduzidos em relação ao forno em decorrência de uma necessidade maior de detalhamento nessas áreas onde que são aplicados às condições de contorno e iniciais. As condições inseridas no software de geração de malha foram as seguintes: fator de escala global utilizado foi 2.0 com tamanho global de sementes de elementos de 150. Os parâmetros de taxa de crescimento de malha e número de camadas foram deixados em default.

**Figura 5.2.1:** Arranjo da malha gerada no forno de craqueamento.



A Figura 5.2.1 apresenta a malha gerada do não-estruturada com o formato tetraédrico na geometria do forno de craqueamento térmico de 1,2-dicloroetano e observa-se um maior refinamento da malha nos queimadores por apresentar menores dimensões do que o restante do equipamento.

### 5.3. Modelagem Matemática

De forma a representar o sistema em estudo, foi proposta uma modelagem matemática que está presente no trabalho Hu *et al.* (2015) onde foram consideradas as equações de conservações (massa, momentum e energia), além do escoamento turbulento (modelo k- $\epsilon$ ), fenômeno de combustão (Eddy-Dissipation) e transferência de calor por radiação (modelo P1 e DTM) tal mostradas na Seção 3.8 e aplicadas considerações necessárias ao problema em estudo.

Portando, para o sistema em estudo foram aplicadas considerações e simplificações que contribuíram para a modelagem utilizada.

Considerações propostas:

- 1) Regime estacionário;
- 2) Fluidos são newtonianos e incompressíveis;
- 3) Paredes do forno adiabáticas;
- 4) Gás combustível apenas o gás metano;
- 5) Comburente sendo o ar;
- 6) Mistura homogênea utilizando o modelo Euleriana-Euleriana.

Os modelos definidos para a simulação foram o de turbulência modelo k- $\epsilon$ , de Jones e Laucher (Equações 3.8.7 e 3.8.8) e o modelo de combustão adotado foi o Eddy-Dissipation (Equação 3.8.12).

Na equação de transferência de calor foi utilizado 4 modelos de soluções diferentes para avaliação de seus resultados, que são: P-1 (Equação 3.8.12), Rosseland (Equação 3.8.18), Transferência Discreta (Equação 3.8.20) e Monte Claro (Seção 3.8.4.4).

O pacote comercial utilizado para resoluções das equações foi ANSYS CFX<sup>®</sup>, versão 13.0. Onde encontra-se os modelos de escoamento, combustão e radiação em seu pacote. As simulações foram desenvolvidas em um computador Intel Core i7, 4<sup>a</sup> geração,

de 3,60 GHz com 8 Gb de memória RAM e 1 Tb de capacidade física de armazenamento.

#### 5.4. Condições iniciais e de contorno

##### 5.4.1. Propriedades dos fluidos

O combustível usado foi o metano puro e comburente o ar atmosférico, tendo se adotado 23,2% em massa do gás oxigênio na mistura do ar, conforme a Tabela 5.4.1. Os dados de densidade de entrada das substâncias obtidas do banco de dados da ANSYS®.

**Tabela 5.4.1:** Densidade e fração mássica de entrada dos fluidos de combustão.

	<b>Metano (CH<sub>4</sub>)</b>	<b>Oxigênio (O<sub>2</sub>)</b>
<b>Fração Mássica</b>	1,0	0,232
<b>Densidade (kg/m<sup>3</sup>)</b>	0,656	1,185

Fonte: ANSYS, 2016.

A Tabela 5.4.1 apresenta as propriedades necessárias para iniciar a solução da estequiometria da reação de combustão (fração mássica) e as equações de conservações (densidade).

##### 5.4.2. Condições de processo e operacionais

As condições de operação foram obtidas através das condições de projetos e operação do equipamento em estudo, como mostram as tabelas 5.4.2 e 5.4.3. A fonte não pode ser revelada devido ao sigilo industrial. Os valores de velocidade nos queimadores variam de acordo com a posição destes da fileira onde se encontram dentro do equipamento. De acordo com dados de projeto, trabalha-se 15% de excesso de ar nos queimadores.

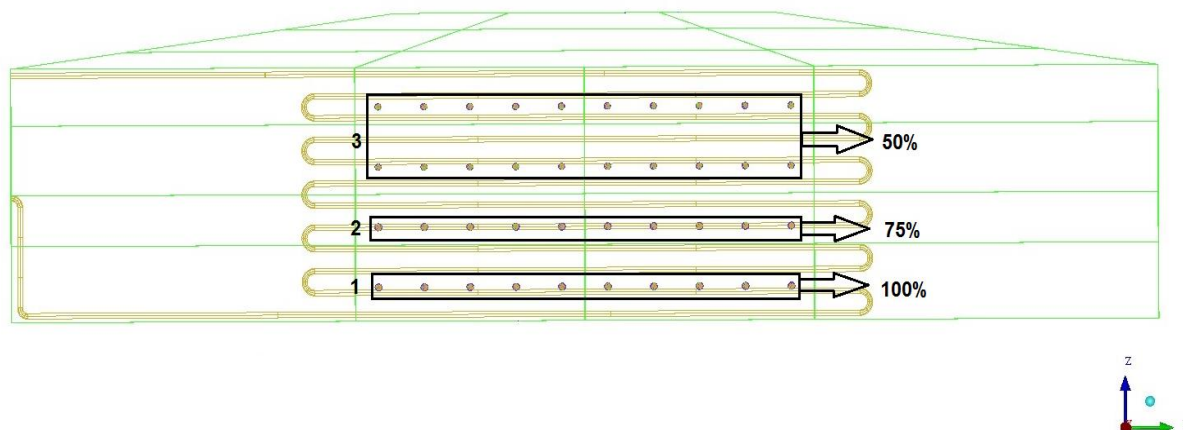
**Tabela 5.4.2:** Condições iniciais de velocidade.

<b>Fileira</b>	<b>Velocidade do metano (m/s)</b>	<b>Velocidade do ar (m/s)</b>
1 <sup>a</sup>	50,00	57,50
2 <sup>a</sup>	37,50	43,13
3 <sup>a</sup>	25,00	28,75

Fonte: Folha de dados do fabricante do equipamento.

A Tabela 5.4.2 apresenta as velocidades dos reagentes da combustão, esses valores foram calculados de acordo com a vazão de projeto, sigilo industrial, com relação à potência de cada fileira.

**Figura 5.4.1:** Porcentagem das potências de cada fileira de queimadores.



A Figura 5.4.1 representa a porcentagem de potência para cada fileira de queimadores, sendo a 1ª fileira a da base, a 2ª fileira central e a 3ª fileira composta por duas fileiras do topo, conforme os dados do fabricante.

**Tabela 5.4.3:** Condições iniciais do sistema.

Condição	Valor
Pressão de saída (atm)	0,009
Temperatura do metano (K)	300
Temperatura do ar (K)	300

Fonte: Folha de dados do fabricante do equipamento.

A Tabela 5.4.3 mostra as condições operacionais do forno: as temperaturas de entrada dos reagentes da combustão e a pressão interna do forno.

#### 5.4.3. Natureza da simulação

As simulações foram conduzidas no estado estacionário como uma forma de reduzir o esforço computacional existente na complexidade do conjunto de resoluções dos modelos do sistema em estudo.

**Tabela 5.4.4:** Características da simulação.

Componentes da Modelagem	Atribuições
Esquema de Advecção	High Resolution
Crítério de Convergência	$1 \times 10^{-4}$
Número de iterações	1000

Tabela 5.4.4 mostra as características da simulação que foram adotadas para solucionar as interpolações, o esquema High Resolution, onde tem alta precisão nas soluções. O erro adotado para convergência foi um erro considerável de  $1 \times 10^{-4}$  para não sobrecarregar a simulação e o número de iterações foi até 1000.

## 6. RESULTADOS

### 6.1. Influência da malha ótima

Na utilização de pacotes computacionais que tem como soluções visuais e numéricas em suas representações e discussões de resultados analíticos, um dos fatores que deve ser considerado é a confiabilidade da resposta obtida. Na fluidodinâmica computacional onde o domínio é representado por uma malha, existem diversas conformações e com elementos de malha diversificados e a distribuição desses elementos através da geometria é um fator determinante para os resultados.

A solução numérica se dá através do MVF (método dos volumes finitos), conforme explicado na Seção 3.7, onde os valores de fronteira dos elementos de controle aplicados ao cálculo do sistema de equações diferenciais regem os fenômenos. Então, é esperado que quanto maior o número de elementos, mais precisos serão os resultados visuais e numéricos, levando, então, um maior tempo de processamento virtual.

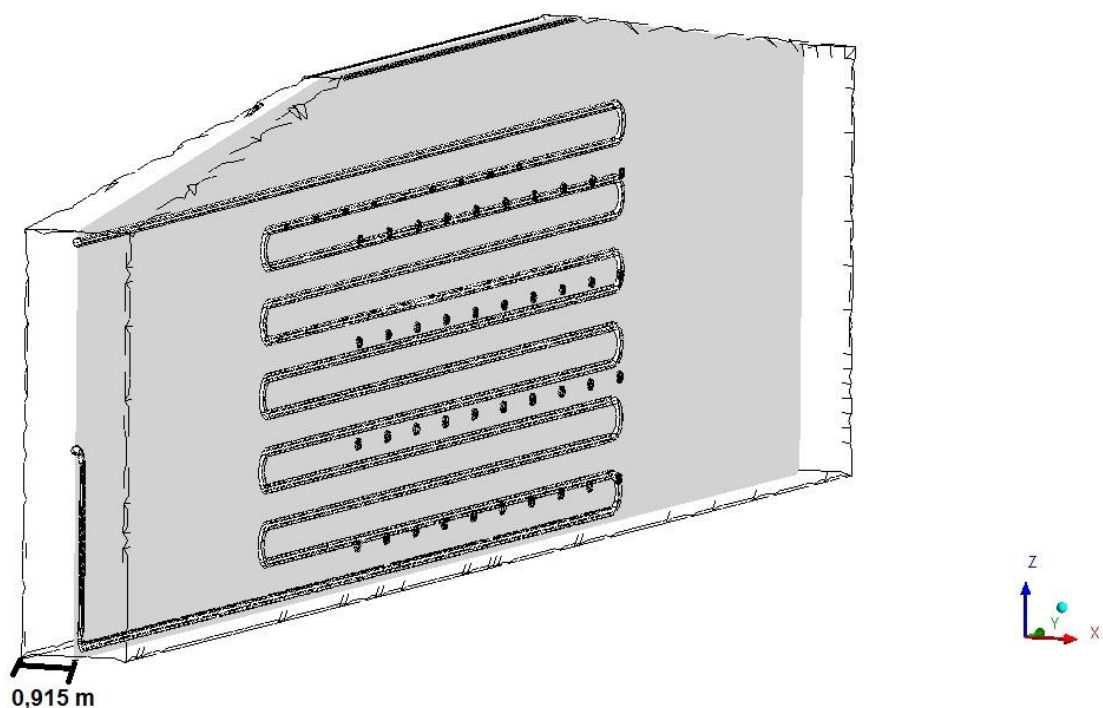
Estudos envolvendo CFD em equipamentos existem o detalhamento de setores que são bastante menores do que a estrutura do equipamento, elevando assim o número de elementos gerados em seu domínio geométrico, conseqüentemente, elevando o esforço computacional inicial. Soma-se a isso o fato, do fenômeno de combustão relacionar reação química e transferência de calor com diferentes velocidades de processamento, aumentando a complexidade do sistema de equações. Ou seja, mesmo aliado a processadores modernos, o tempo de simulação de grandes elementos sobre conjuntos de fenômenos limita a fluidodinâmica computacional e pode tornar o estudo improdutivo.

Para avaliação de domínios com relação aos seus números de elementos, foram feitos testes preliminares que através de simulações, utilizando os fluidos da Tabela 5.4.1 na geometria descrita na Seção 5.1, foi variado o número total de elementos que existem na malha, buscando ter uma variação aleatória do número total de elementos, a fim de selecionar uma malha mais adequada para o estudo, visando o esforço computacional e qualidade do resultado. Os números totais de elementos gerados foram de 1,5 milhões, 5,4 milhões e 8,9 milhões. Para essa avaliação foram utilizados os mesmos modelos de escoamento turbulento (modelo k- $\epsilon$ ), que foi adotado por não considerar escoamento perto das paredes e pela maioria dos estudos utilizarem esse

modelo (HU *et al.*, 2016; FANG, QIU E ZHOU, 2017; LI *et al.*, 2015; HU *et al.*, 2015). Foi utilizado também o modelo de combustão (modelo Eddy-Dissipation) na qual a velocidade da reação química da combustão é rápida e na transferência de calor por radiação (modelo P-1). Esse modelo simplifica a transferência de calor em suas aberturas e dá o foco maior nos corpos sólidos, e também utiliza as condições iniciais referentes às Tabelas 5.4.2, 5.4.3 e 5.4.4.

Para uma análise dos dados, foram comparados três diferentes planos, justamente os planos da simetria do equipamento em estudo. O primeiro plano é o YZ, sendo x igual a 0,915 m que representa a metade do equipamento (Figura 6.1.1). O segundo plano é o ZX, com y igual a 15,24 m onde representa a metade de uma coluna de queimadores (Figura 6.1.2). O terceiro plano é o XY, com z igual a 4,295 m (Figura 6.1.3). Para todos os planos foram tirados uma média de temperatura e comparadas entre si, também foi realizado um estudo estatístico através do erro relativo, onde tomou como valor real os valores das médias de temperaturas da malha com maior número de elementos, 8,9 milhões de elementos. Os resultados para avaliação do número total de elementos estão dispostos na Tabela 6.1.1 e Gráfico 6.1.1.

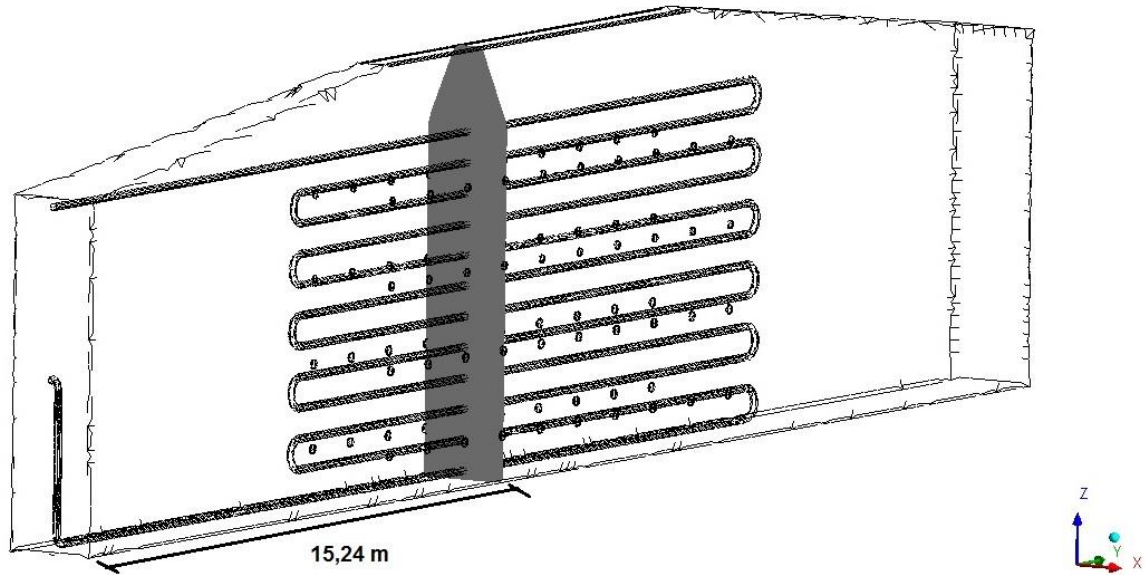
**Figura 6.1.1:** Plano YZ no comprimento 0,915 m.



ANSYS

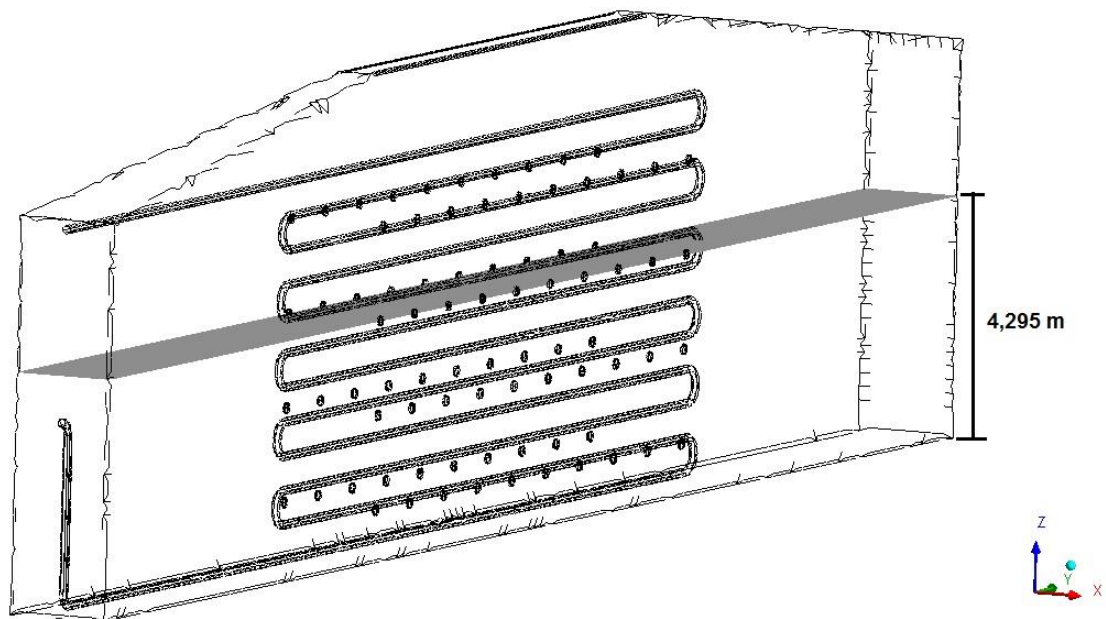
**Figura 6.1.2:** Plano ZX no comprimento 15,24 m.

ANSYS



**Figura 6.1.3:** Plano XY no comprimento 4,295 m.

ANSYS

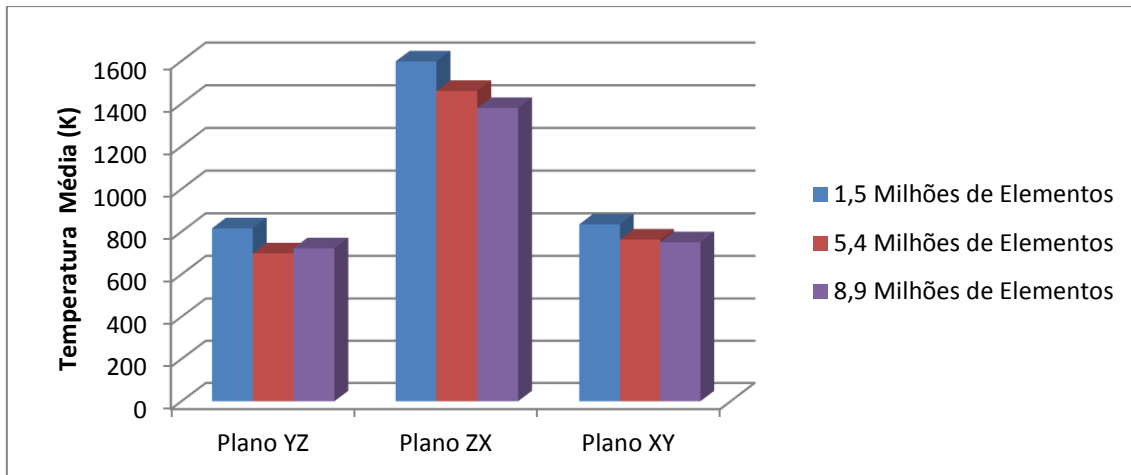


A Tabela 6.1.1 e o Gráfico 6.1.1 mostram as temperaturas médias e o erro relativo em cada plano para cada número de elementos. Através do Gráfico 6.1.1 é possível observar que exceto para a malha 1,5 milhões de elementos, os resultados das temperaturas médias e o erro relativo, mostrado na Tabela 6.1.1, para as demais malhas são equivalentes. Isso sinaliza para a eliminação da malha de 1,5 milhões de elementos. Entretanto, como se pode observar no Gráfico 6.1.2 o tempo computacional, relacionado ao esforço computacional, aumenta exponencialmente à medida que o número total de elementos aumenta, como já era de se esperar. Isso sinaliza uma vantagem para a malha de 5,4 milhões de elementos. Para embasar melhor a escolha, faz-se necessário se investigar os perfis de temperatura gerados dentro do forno para as diversas malhas.

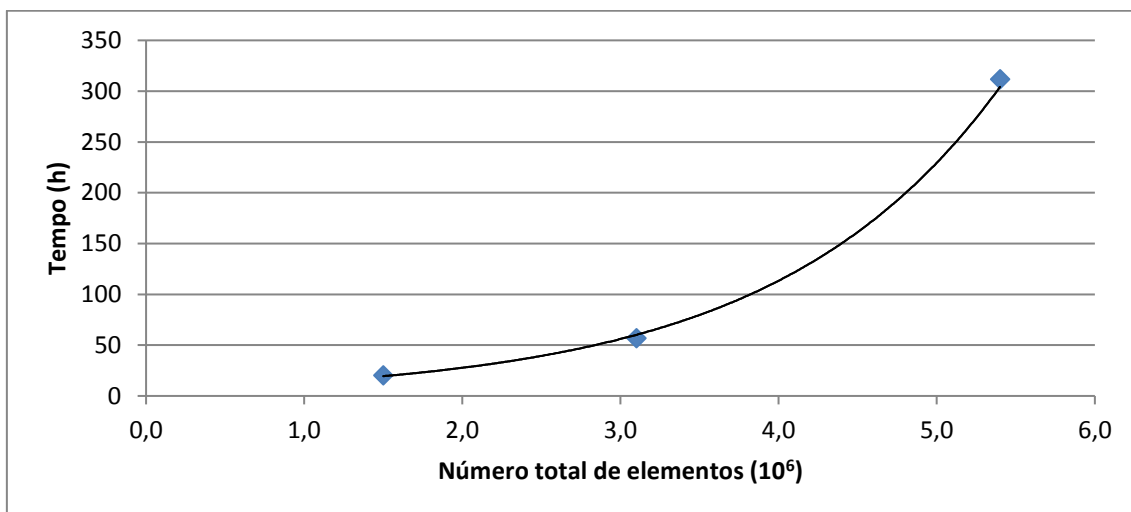
**Tabela 6.1.1:** Número total de elementos, temperaturas médias, erro relativo, erro relativo médio e o tempo de processamento.

<b>Número Total de Elementos (milhões)</b>	<b>Plano</b>	<b>Temperatura Média (K)</b>	<b>Erro Relativo (%)</b>	<b>Erro Relativo Médio (%)</b>	<b>Tempo (h)</b>
1,5	YZ	816,28	12,9	13,3	20,17
	ZX	1598,29	15,8		
	XY	834,89	11,2		
5,4	YZ	698,71	3,3	3,6	56,63
	ZX	1460,42	5,8		
	XY	763,66	1,7		
8,9	YZ	722,77	-	-	311,78
	ZX	1380,36	-		
	XY	750,98	-		

**Gráfico 6.1.1:** Número total de elementos com suas temperaturas médias em cada plano.



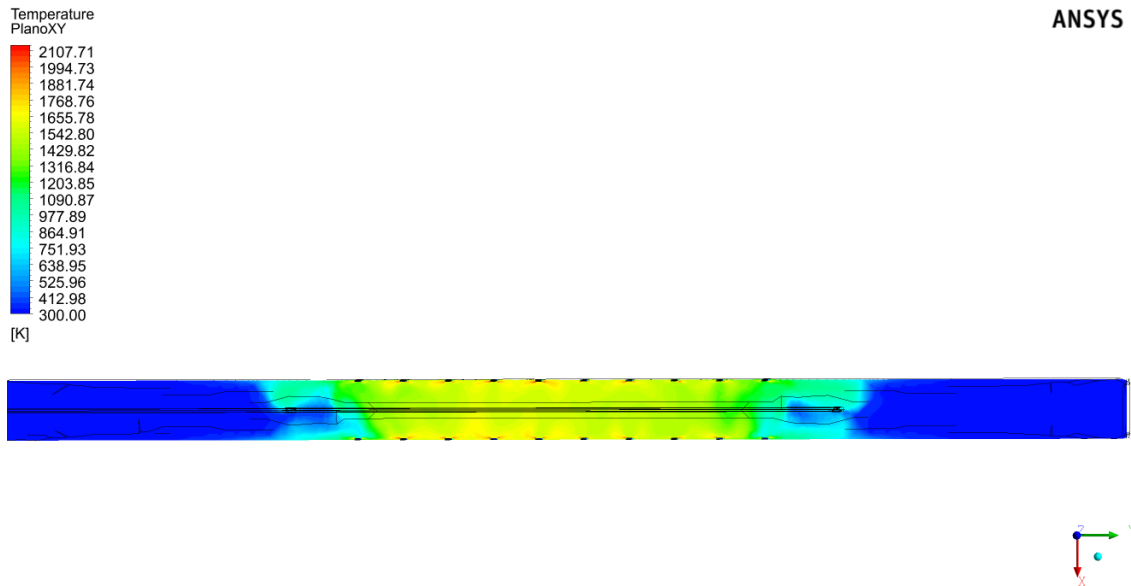
**Gráfico 6.1.2:** Número total de elementos com tempo de processamento.



A seguir são apresentadas as Figuras 6.1.4 a 6.1.5 que representam as variações de temperatura na câmara de radiação do forno de craqueamento nos planos gerados nas Figuras 6.1.1, 6.1.2 e 6.1.3. Os resultados dos perfis de temperatura do equipamento apresentam um aumento na qualidade visual dos fenômenos, combustão e radiação, e uniformidade da variável em estudo, temperatura, isso com o aumento dos números de elementos, demonstra a confirmação da eliminação da malha de 1,5 milhões de elementos. As demais malhas apresentaram leves diferenças entre si, dando vantagem na qualidade visual para as malhas de maior número de elementos 8,9 milhões e 5,4 milhões de elementos.

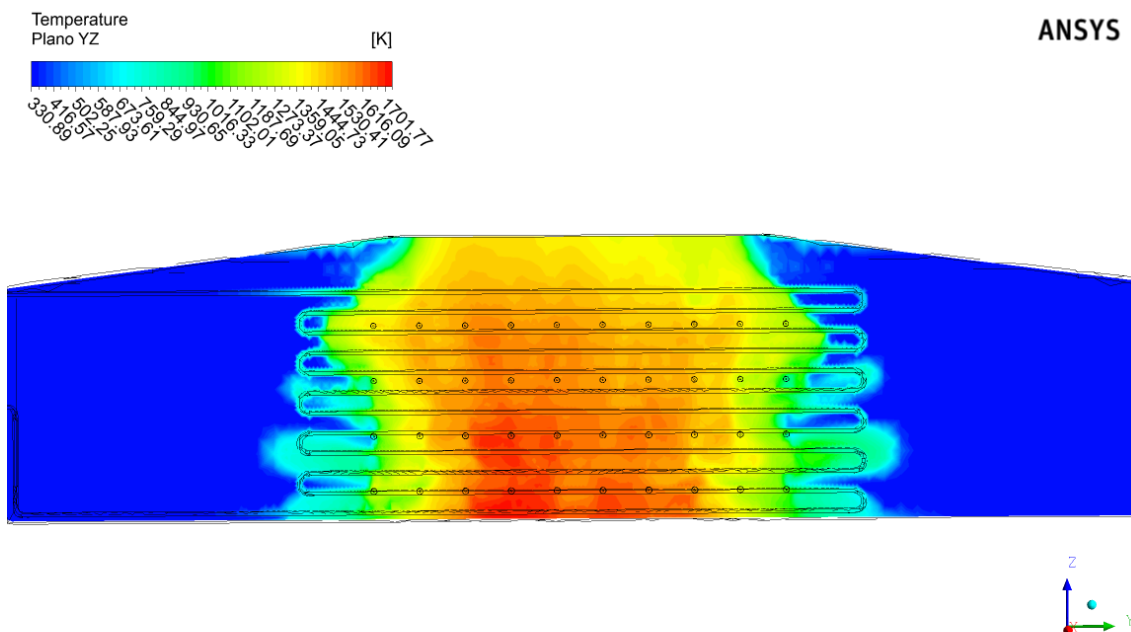
- **Malha de 1,5 milhões de elementos:**

**Figura 6.1.4:** Variação de temperatura no forno em uma vista superior do forno no plano XY para a malha de 1,5 milhões de elementos.



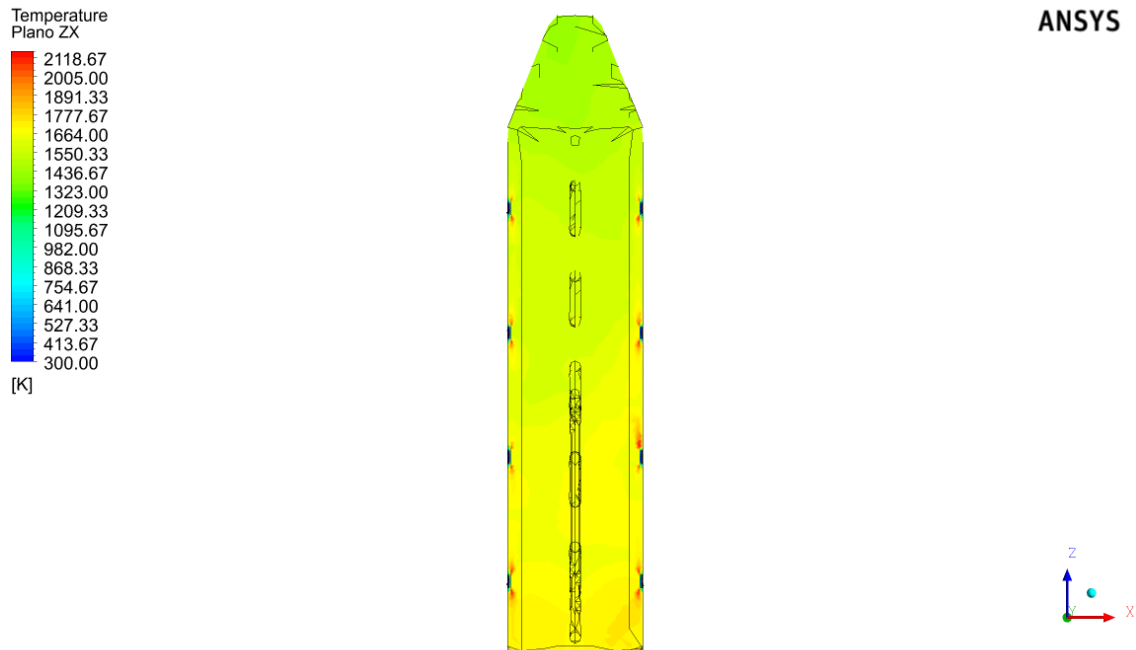
A Figura 6.1.4 mostra que nos queimadores, encontrado na parede do forno, há uma maior temperatura, justamente onde ocorre a combustão, porém essa temperatura estende para próximo do reator, não havendo uma uniformidade na temperatura.

**Figura 6.1.5:** Variação de temperatura no forno em uma vista lateral do forno no plano YZ para a malha de 1,5 milhões de elementos.



A Figura 6.1.5 mostra que em seu centro, justamente onde encontram-se os queimadores, há uma maior temperatura, porém, essa temperatura variaria muito antes de seguir para suas extremidades do forno, não havendo uma uniformidade na temperatura.

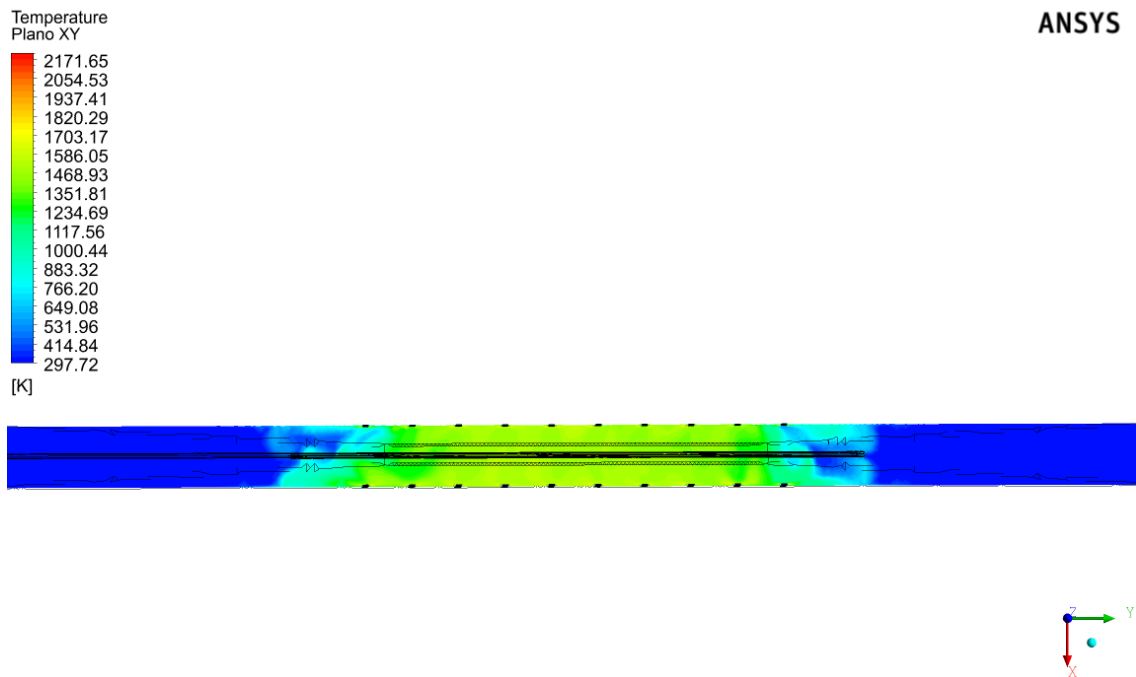
**Figura 6.1.6:** Variação de temperatura no forno em uma vista do forno no plano ZX para a malha de 1,5 milhões de elementos.



A Figura 6.1.6 apresenta uma fileira de queimadores em seu centro. Na base do forno há uma maior temperatura, porém no topo do forno há menores gradientes de temperaturas, novamente ocorrendo não uniformidade na temperatura.

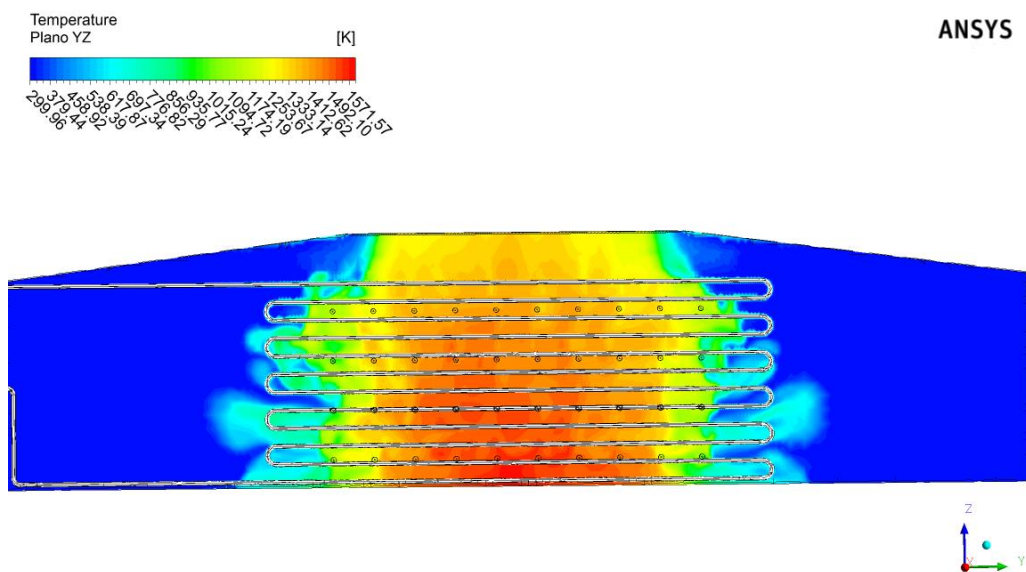
- **Malha de 5,4 milhões de elementos:**

**Figura 6.1.7:** Variação de temperatura no forno em uma vista superior do forno no plano XY para a malha de 5,4 milhões de elementos.



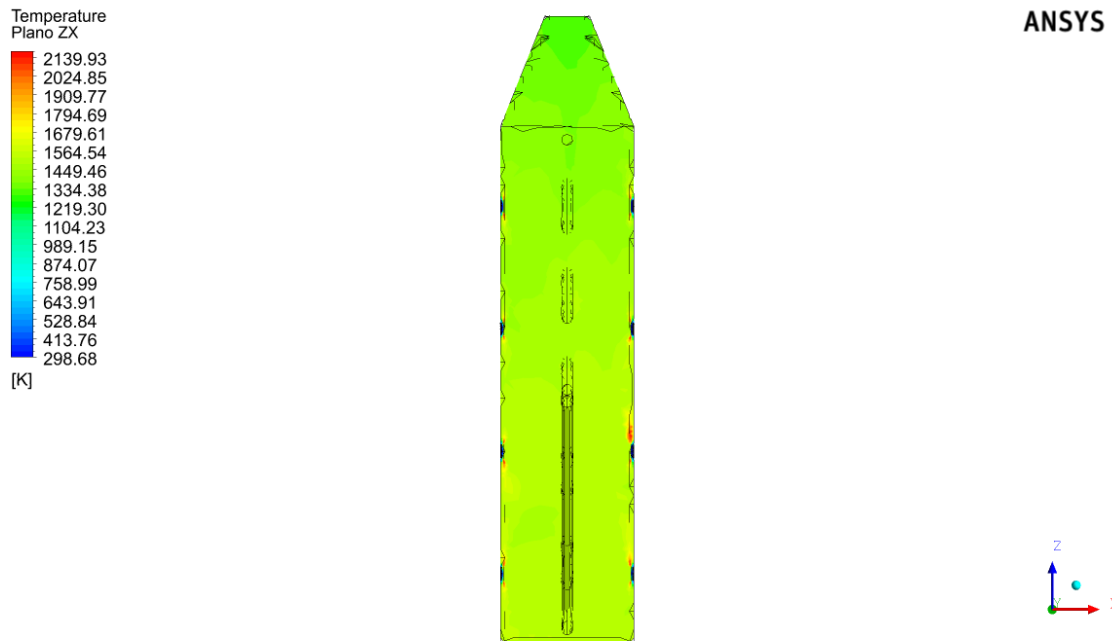
A Figura 6.1.7 mostra que nos queimadores, encontrado na parede do forno, há uma uniformidade da temperatura ao longo dos queimadores até o reator, não ocorrendo grandes variações de temperatura.

**Figura 6.1.8:** Variação de temperatura no forno em uma vista lateral do forno no plano YZ para a malha de 5,4 milhões de elementos.



Na Figura 6.1.8 mostra que em seu centro, justamente onde encontram-se os queimadores, há uma maior temperatura, porém, essa temperatura variaria suavemente antes de seguir para suas extremidades do forno.

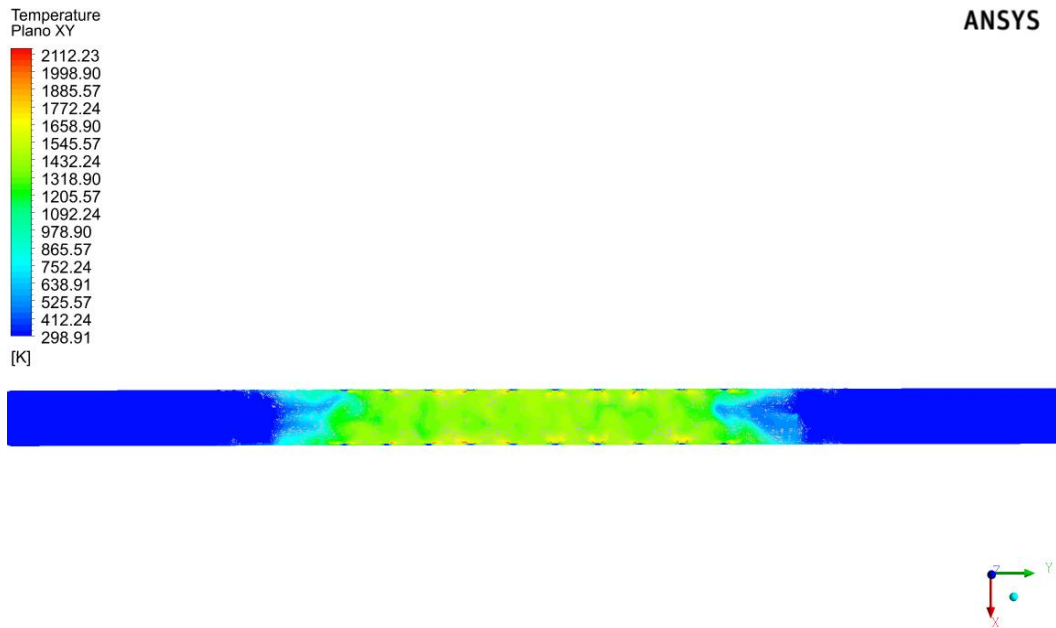
**Figura 6.1.9:** Variação de temperatura no forno em uma vista do forno no plano ZX para a malha de 5,4 milhões de elementos.



A Figura 6.1.9 apresenta uma fileira de queimadores em seu centro. Na base e no topo do forno há uniformidade da temperatura em todo o plano.

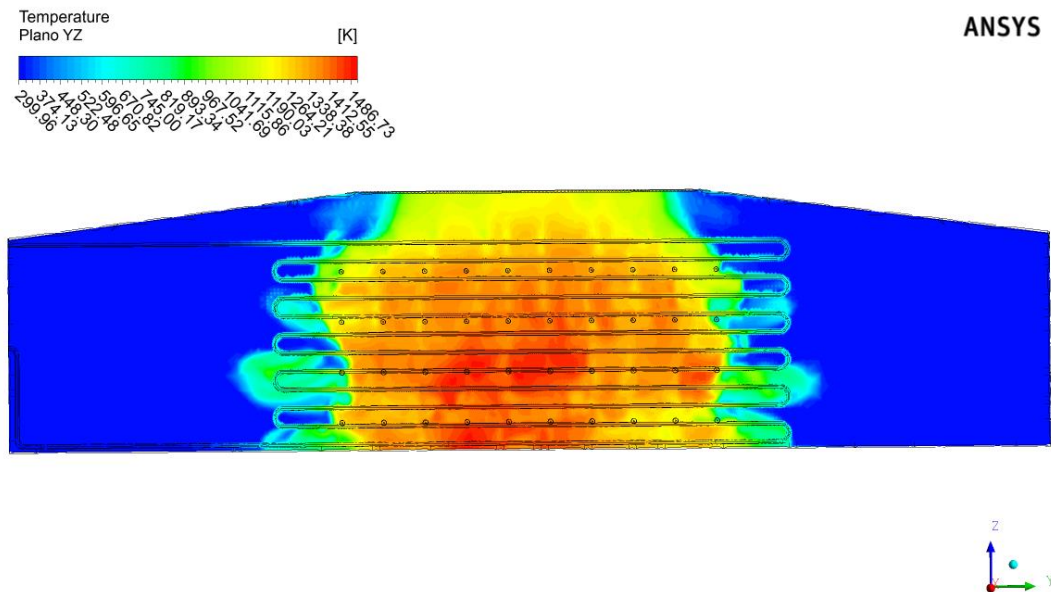
- **Malha de 8,9 milhões de elementos:**

**Figura 6.1.10:** Variação de temperatura no forno em uma vista superior do forno no plano XY para a malha de 8,9 milhões de elementos.



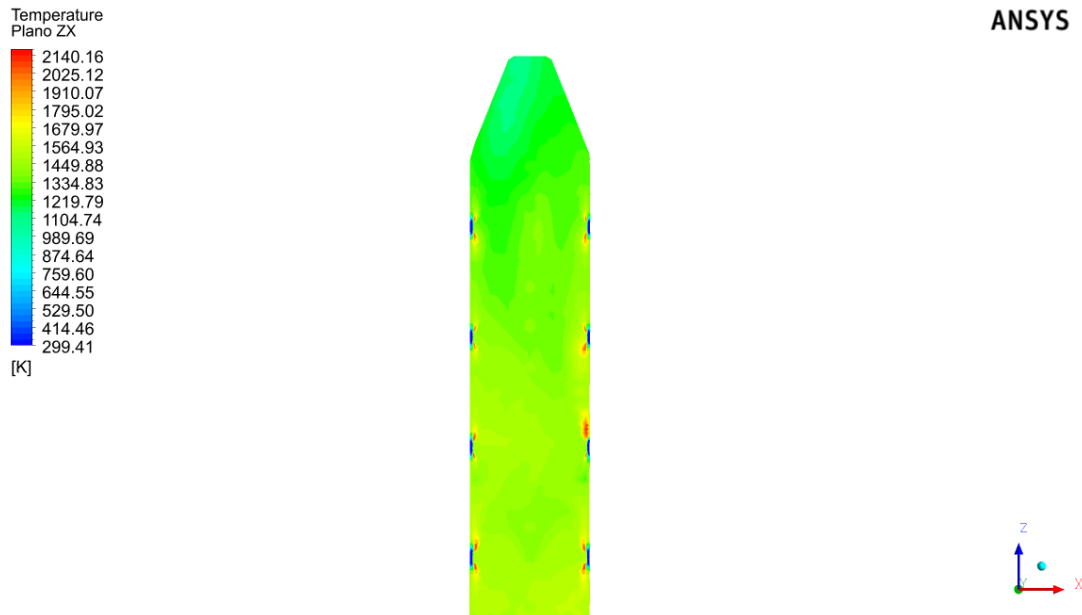
A Figura 6.1.10 mostra que nos queimadores, encontrado na parede do forno, há uma suave uniformidade da temperatura ao longo dos queimadores até o reator, não ocorrendo grandes variações de temperatura, semelhante da Figura 6.1.7.

**Figura 6.1.11:** Variação de temperatura no forno em uma vista lateral do forno no plano YZ para a malha de 8,9 milhões de elementos.



A Figura 6.1.11 mostra que em seu centro, justamente onde encontram-se os queimadores, há uma maior temperatura, porém, essa temperatura variaria suavemente antes de seguir para suas extremidades do forno, semelhante à Figura 6.1.8.

**Figura 6.1.12:** Variação de temperatura no forno em uma vista do forno no plano ZX para a malha de 8,9 milhões de elementos.



A Figura 6.1.12 apresenta uma fileira de queimadores em seu centro. Na base e no topo do forno há uniformidade da temperatura em todo o plano, semelhante à Figura 6.1.9.

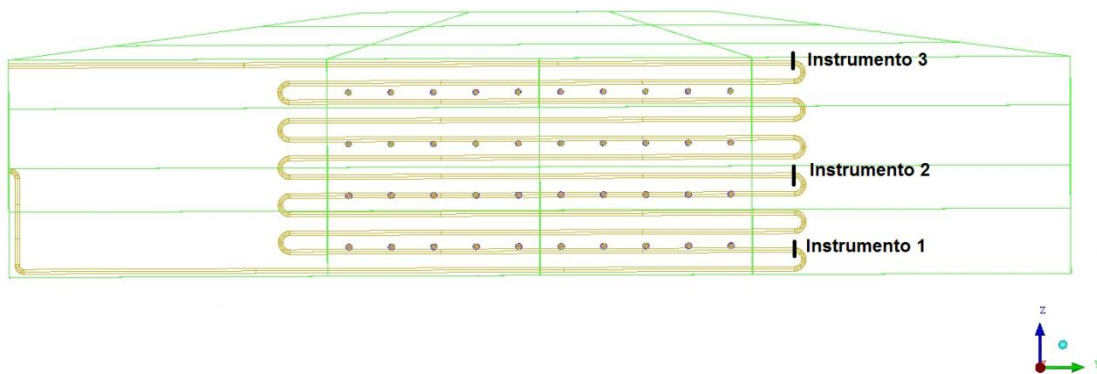
Diante dos resultados das variáveis que influenciam a malha, erro relativo de temperatura, tempo computacional e qualidade visual, foi perceptível a eliminação da menor malha, 1,5 milhões de elementos, por não ter um erro relativo médio grande e não ter qualidade visual dos seus resultados. A malha mais refinada, 8,9 milhões de elementos, também foi eliminada pela sua inviabilidade computacional, porque precisou de um esforço computacional muito grande para obter a solução. Portanto, seguindo a literatura, segundo Garcez (2017) que demonstra que refinamento da malha melhora a qualidade dos resultados, a qualidade visual e erros pequenos com relação às variáveis, confirmou-se a viabilidade da escolha da malha intermediária de 5,4 milhões de elementos.

## 6.2. Influência dos modelos de radiação

Após a escolha da malha de 5,4 milhões de elementos, foi possível estudar o equipamento e observar os fenômenos envolvidos. A escolha do modelo de radiação é crucial para se obter uma boa descrição dos fornos, desse modo, resolveu-se estudar quatro modelos de radiação que são P-1, Rosseland, DTM e Monte Carlo. Posteriormente, comparou-se os dados obtidos com dados industriais. Esses foram coletados na unidade industrial, onde não será possível mostrar, por questões de sigilo industrial.

Os dados industriais são obtidos através de termopares que permitem medir a temperatura da tubulação do lado externo. Os termopares ficam localizados nos tubos 2, 6 e 13 (contado de baixo para cima), um instrumento em cada tubo, antes do início da curva como mostra a Figura 6.2.1.

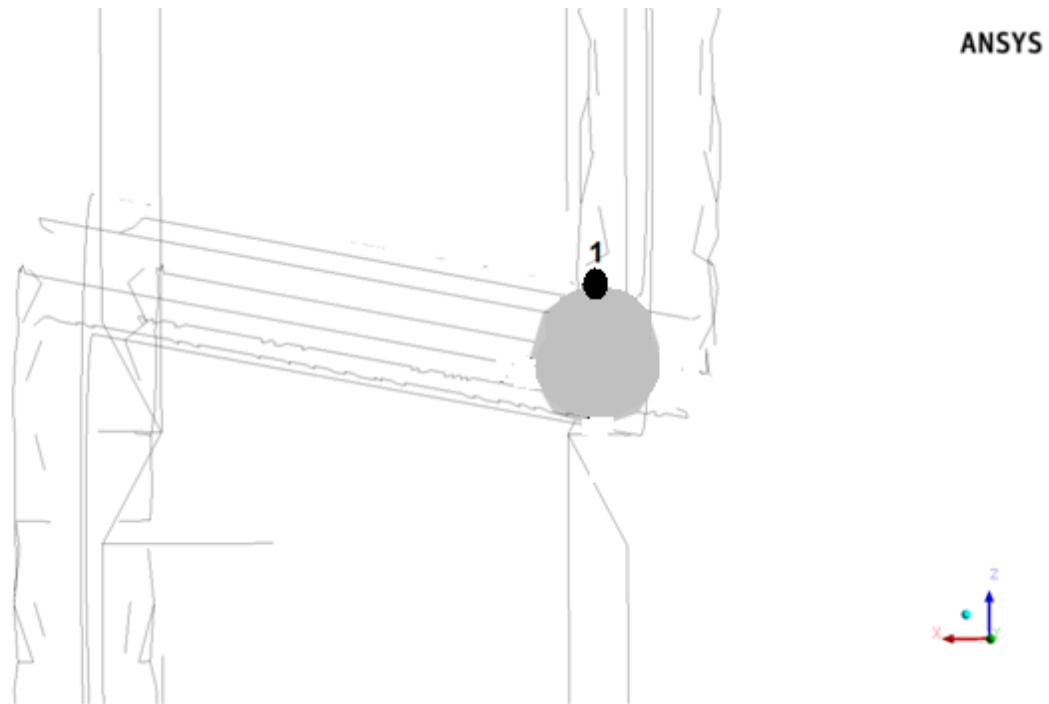
**Figura 6.2.1:** Localização dos instrumentos de medição de temperatura da superfície externa da tubulação do reator.



A Figura 6.2.1 representa os instrumentos de medição de temperatura na superfície do reator, onde o instrumento 1 fica localizado na base do forno, instrumento 2 fica em uma região central do forno e o instrumento 3 fica localizado no topo do equipamento.

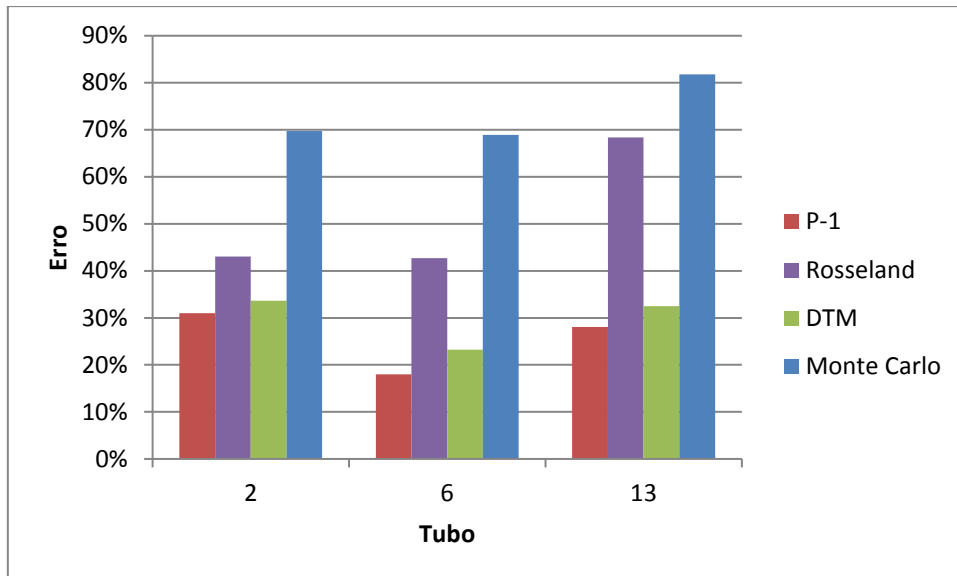
Para comparação entre os resultados obtidos com os modelos e os dados de campo, fez-se de um ponto da superfície externa dos tubos 2, 6 e 13, conforme mostrado na Figura 6.2.2.

**Figura 6.2.2:** Localização dos pontos para cálculo da média de temperatura.



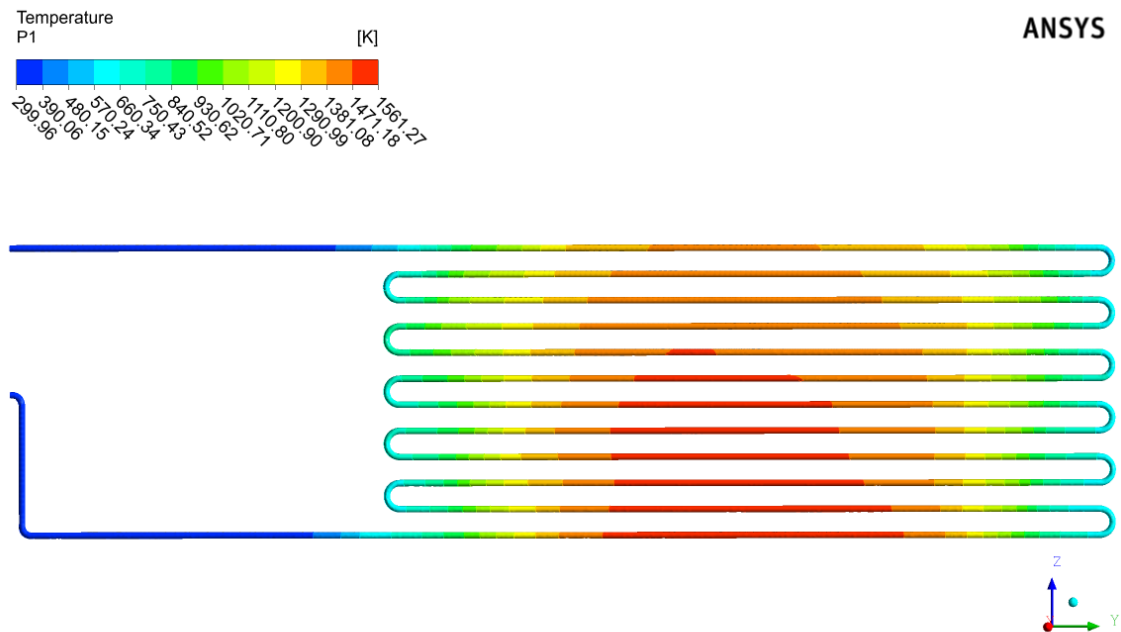
O Gráfico 6.2.1 mostra o módulo do erro relativo entre os resultados de temperatura obtidos com os diferentes modelos de radiação e os dados de campo, não divulgados para atender à política de sigilo industrial. Observa-se que os menores desvios relativos foram obtidos com os modelos P-1 e DTM, que deram resultados equivalentes e, portanto, para o sistema em questão podem ser indicados como sendo os mais adequados. Quanto à magnitude dos desvios relativos obtidos com esses modelos, que variaram entre 18% e 34%, pode-se atribuir a diversos fatores, tais com: modelo de combustão, refinamento da malha, combustível utilizado e detalhamento dos queimadores, os modelos de Monte Carlo e de Rosseland apresentaram os módulos dos desvios relativos muito além do considerado aceitável para o sistema em estudo.

**Gráfico 6.2.1:** Módulos dos erros relativos dos modelos de radiação com os dados industriais.



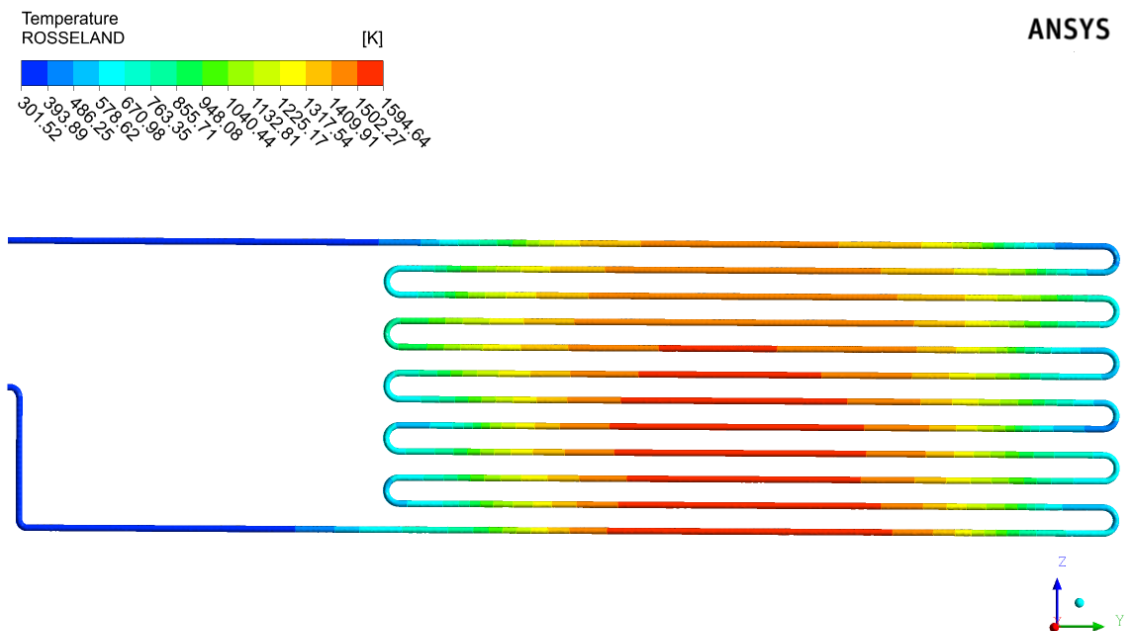
As Figuras de 6.2.3 a 6.2.6 mostram os perfis de temperatura da parede externa do reator tubular obtidos para os quatro modelos de radiação, visando se investigar os motivos dos elevados erros relativos obtidos para os modelos de Rosseland e de Monte Carlo, quando comparados aos do P1 e DTM. Observa-se que, em geral, os modelos analisados fornecem um perfil de temperatura com variação uniforme do centro do feixe tubular para as extremidades e de baixo para cima. Entretanto, quando comparado aos perfis obtidos com P1 e DTM, o modelo de Rosseland calcula um decréscimo de temperatura muito mais acentuado em direção às extremidades da direita, justamente onde estão os instrumentos medidores de temperatura. Com relação ao perfil obtido com o modelo de Monte Carlo, observa-se que é completamente diferente dos outros três, sendo bastante mais frio desde o centro do feixe tubular. Desse modo, conclui-se que os perfis obtidos com os modelos de P1 e DTM são mais próximos dos perfis existentes no equipamento industrial, podendo-se descartar definitivamente o uso dos modelos de Rosseland e de Monte Carlo para esse sistema.

**Figura 6.2.3:** Distribuição de temperatura ao longo do reator tubular através do modelo P1.



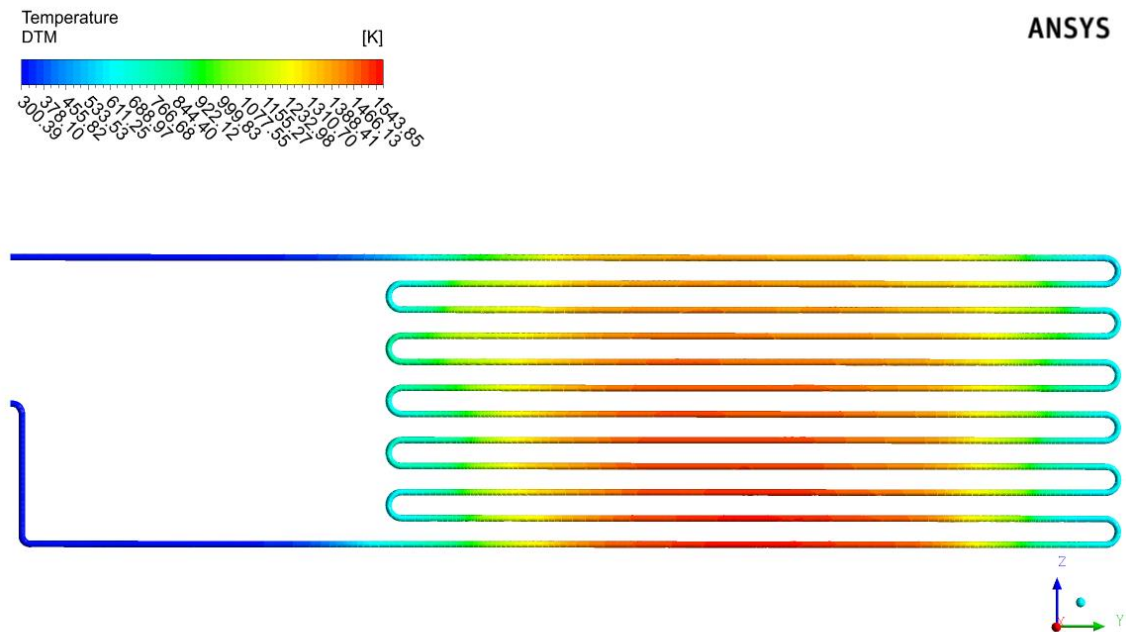
Na Figura 6.2.3 é possível se observar a uniformidade em sua variação de temperatura, onde o centro do reator encontra-se com maiores temperaturas, justamente onde encontram-se os queimadores do forno e à medida que aproxima-se de suas extremidades e afasta-se da grande concentração de queimadores, a temperatura diminui, em uma diminuição gradativa.

**Figura 6.2.4:** Distribuição de temperatura ao longo do reator tubular através do modelo Rosseland.



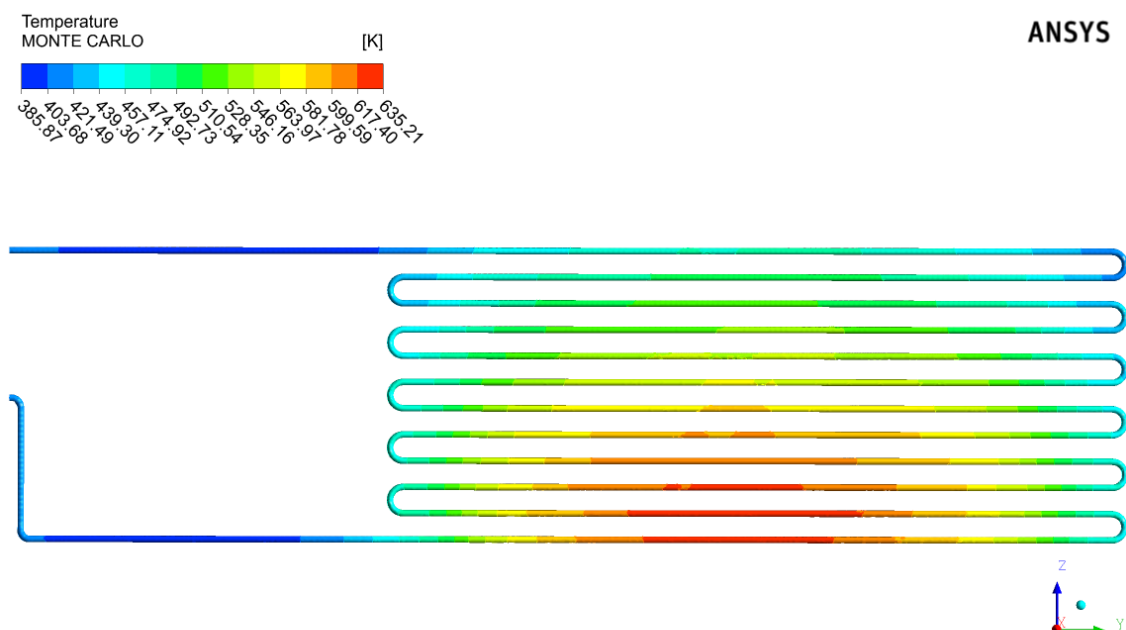
Na Figura 6.2.4 é possível se observar a uniformidade em sua variação de temperatura, onde o centro do reator encontra-se com maiores temperaturas, justamente onde encontram-se os queimadores do forno e à medida que aproxima-se de suas extremidades e afasta-se da grande concentração de queimadores, a temperatura diminui, porém não há uma diminuição gradativa, nas curvas do reator existem uma grande oscilação de temperatura, não sendo uniforme.

**Figura 6.2.5:** Distribuição de temperatura ao longo do reator tubular através do modelo DTM.



Na Figura 6.2.5 é possível se observar a uniformidade em sua variação de temperatura, onde o centro do reator encontra-se com maiores temperaturas, justamente onde encontram-se os queimadores do forno e à medida que aproxima-se de suas extremidades e afasta-se da grande concentração de queimadores, a temperatura diminui, em uma diminuição gradativa.

**Figura 6.2.6:** Distribuição de temperatura ao logo do reator tubular através do modelo Monte Carlo.



Na Figura 6.2.6 é possível se observar a deficiência da uniformidade da temperatura no centro do reator, onde no centro da base encontra-se uma temperatura maior do que no centro do topo e isso se estende para as extremidades do reator.

### 6.3. Análise qualitativa

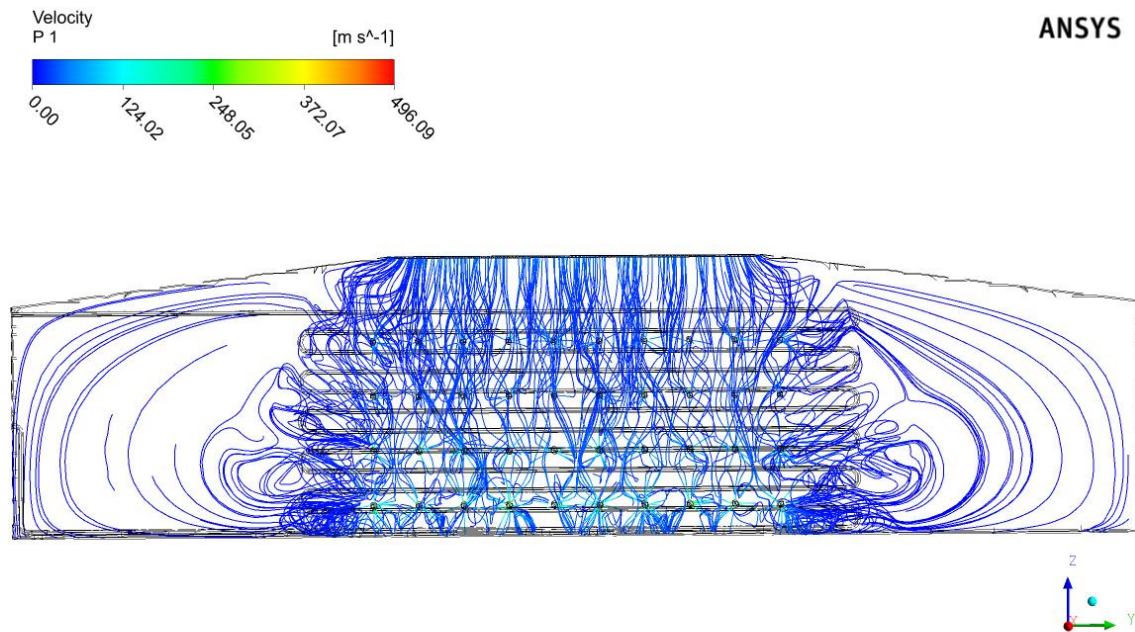
Após a validação do estudo com os dados industriais, foi possível analisar qualitativamente outros fenômenos que permitem a visualização de algumas variáveis importantes do equipamento, dentre elas: velocidades dos fluidos, temperatura, produção de CO<sub>2</sub>.

#### 6.3.1. Linhas de corrente de velocidade

As linhas de corrente de velocidade são importantes para entender o comportamento do escoamento do fluido no interior do equipamento identificando possíveis pontos de estagnação ou de erosão. As Figuras 6.3.1 a 6.3.4, mostram as linhas de corrente para modelos de radiação: P1, Rosseland, DTM e Monte Carlo estudado. Observa-se o escoamento turbulento tendo em vista que adotou-se o modelo k- $\epsilon$ . A maior turbulência ocorreu nos queimadores inferiores, 1<sup>a</sup> e 2<sup>a</sup> fileiras que é determinado pelo fabricante do equipamento, facilitando a dissipação de calor dentro do

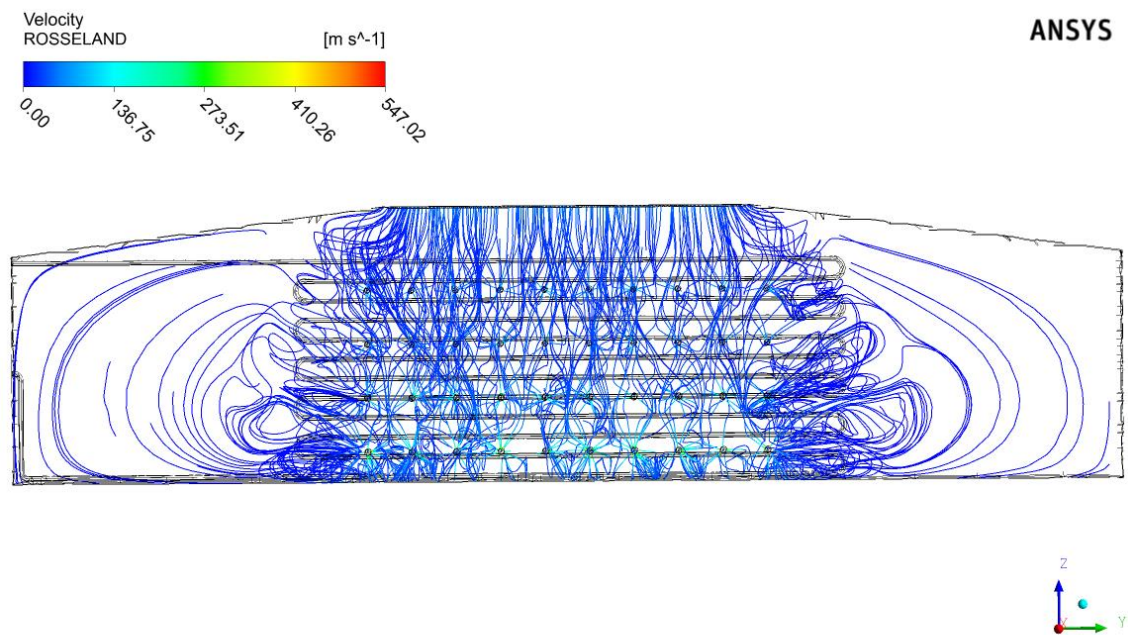
equipamento. Com exceção do modelo Monte Carlo que não estimulou velocidades adequadas para garantir um escoamento turbulento no sistema, mostrado na Figura 6.3.4, os demais modelos, P1, Rosseland e DTM têm os mesmos comportamentos nos escoamentos turbulentos, conforme a Figuras 6.3.1, 6.3.2 e 6.3.3.

**Figura 6.3.1:** Linhas de corrente de velocidade para o modelo P-1.



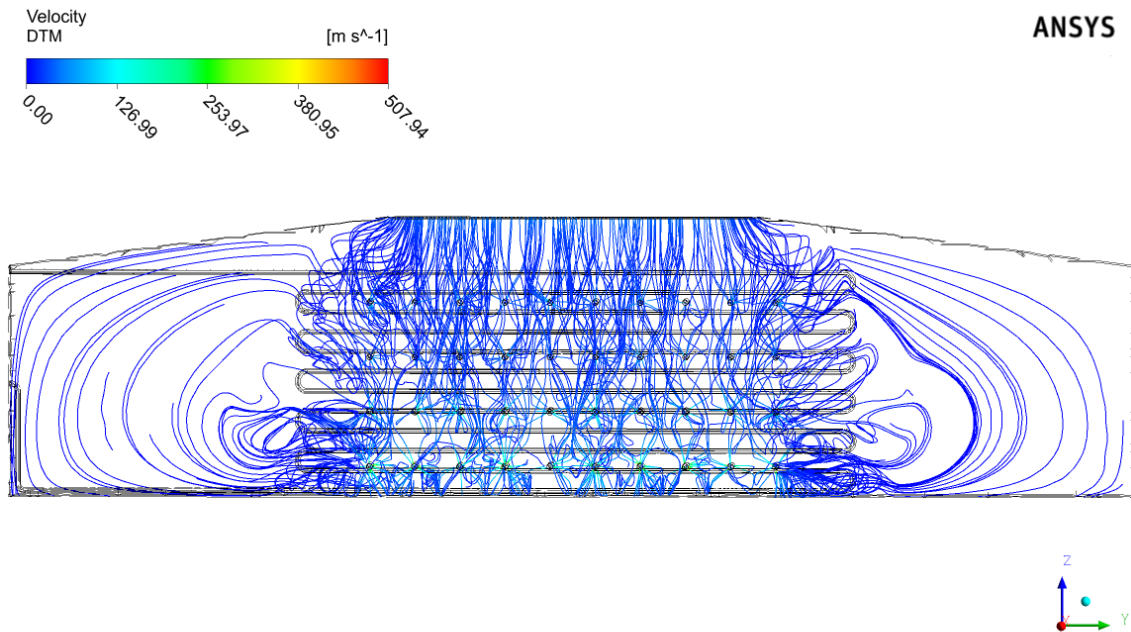
A Figura 6.3.1 mostra o escoamento que ocorre internamente, ocorrendo a maior turbulência nos queimadores inferiores, 1<sup>a</sup> e 2<sup>a</sup> fileira, por terem maiores velocidades, com isso, facilitando a dissipação de temperatura dentro do equipamento. Nas regiões das extremidades a turbulência se torna menor, por não haver necessidade de ter temperatura.

**Figura 6.3.2:** Linhas de corrente de velocidade para o modelo Rosseland.



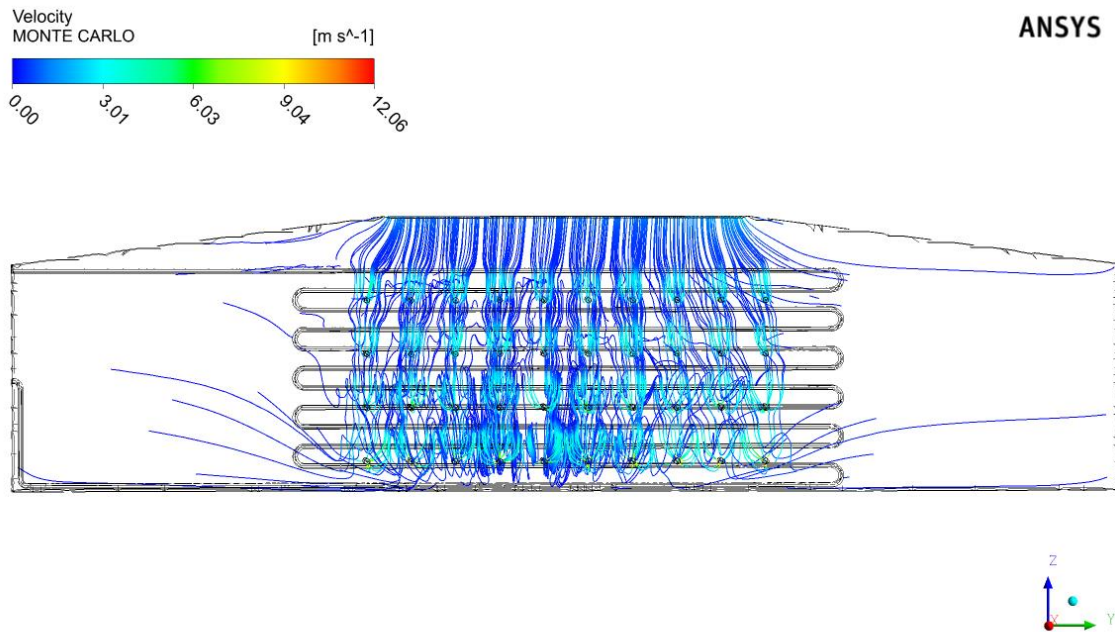
A Figura 6.3.2 apresenta o maior escoamento turbulento nos queimadores inferiores, 1<sup>a</sup> e 2<sup>a</sup> fileira, por terem maiores velocidades, com isso, ajudando a dissipação de temperatura dentro do equipamento, principalmente no seu centro. Nas regiões das extremidades a turbulência se torna menor, por não haver necessidade de ter temperatura.

**Figura 6.3.3:** Linhas de corrente de velocidade para o modelo DTM.



A Figura 6.3.3 mostra o escoamento que ocorre internamente no equipamento, onde ocorre a maior turbulência nos queimadores inferiores, 1<sup>a</sup> e 2<sup>a</sup> fileira, por terem maiores velocidades, com isso, facilitando a dissipação de temperatura dentro do equipamento. Nas regiões das extremidades a turbulência se torna menor, por não haver necessidade de ter temperatura.

**Figura 6.3.4:** Linhas de corrente de velocidade para o modelo Monte Carlo.

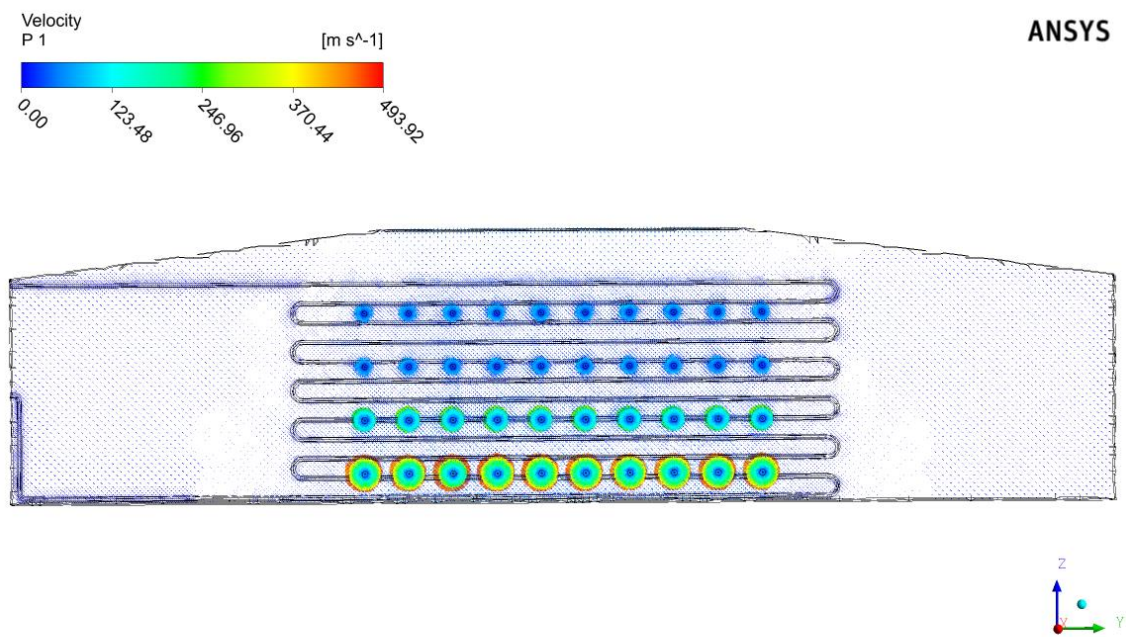


A Figura 6.3.5 apresenta o escoamento turbulento com pouca intensidade nos queimadores, com isso, não facilita a dissipação de temperatura e prejudica o aquecimento dentro do equipamento.

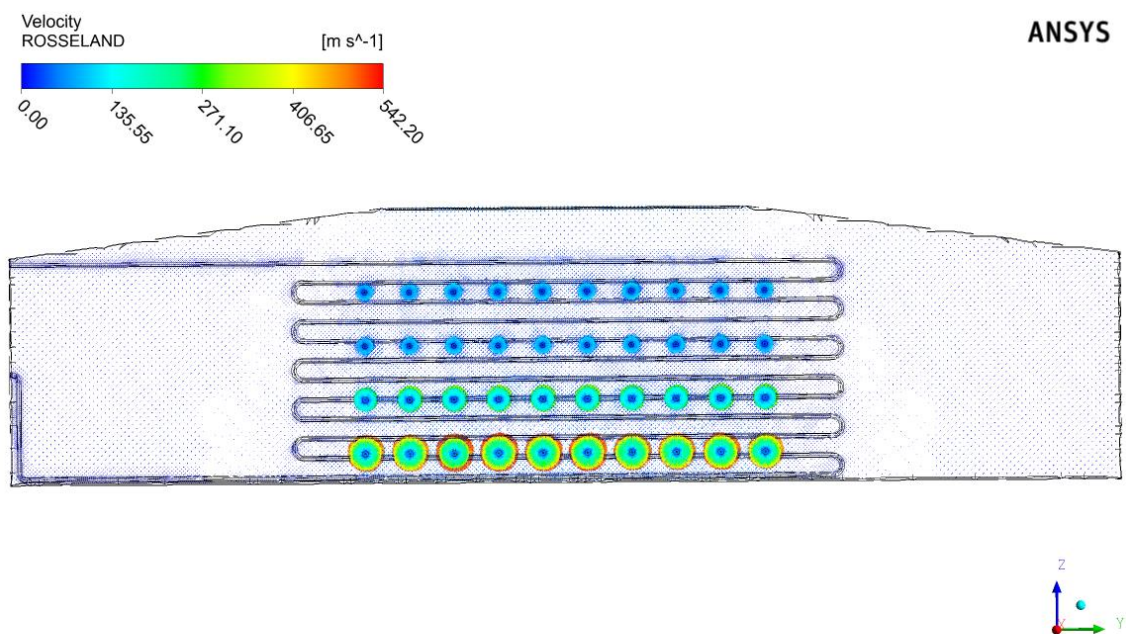
### 6.3.2. Vetores de velocidade

Os vetores de velocidade são importantes assim como a linha de correntes de velocidades, para entender e localizar a intensidade da velocidade, podendo compreender o tipo de escoamento dentro do sistema. As Figuras de 6.3.5 a 6.3.8 mostram os vetores velocidade para modelos de radiação: P1, Rosseland, DTM e Monte Carlo. Esses vetores estão associados às potências dos queimadores, conforme a Figura 5.4.1. Assim, observa-se que os queimadores da base são mais potentes que os queimadores superiores. As potências elevadas favorecem ao aumento das velocidades dos reagentes e produtos da combustão, fazendo com que a intensidade do escoamento turbulento aumente, conforme se observou nas Figuras 6.3.1, 6.3.2 e 6.3.3.

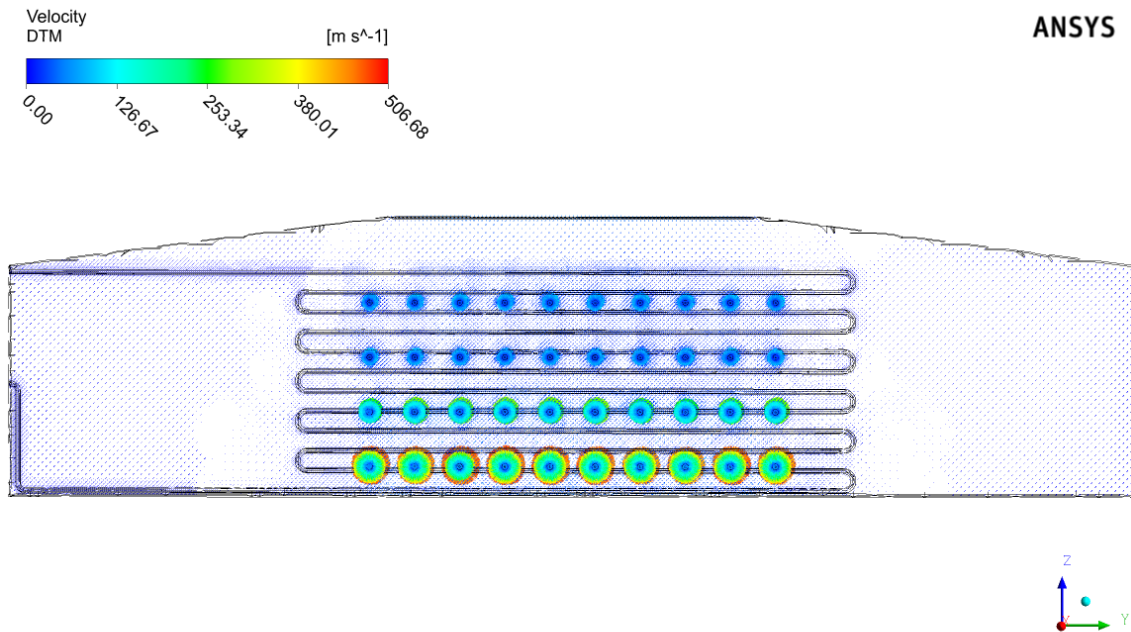
**Figura 6.3.5:** Vetores de velocidade para o modelo P-1.



**Figura 6.3.6:** Vetores de velocidade para o modelo Roseland.

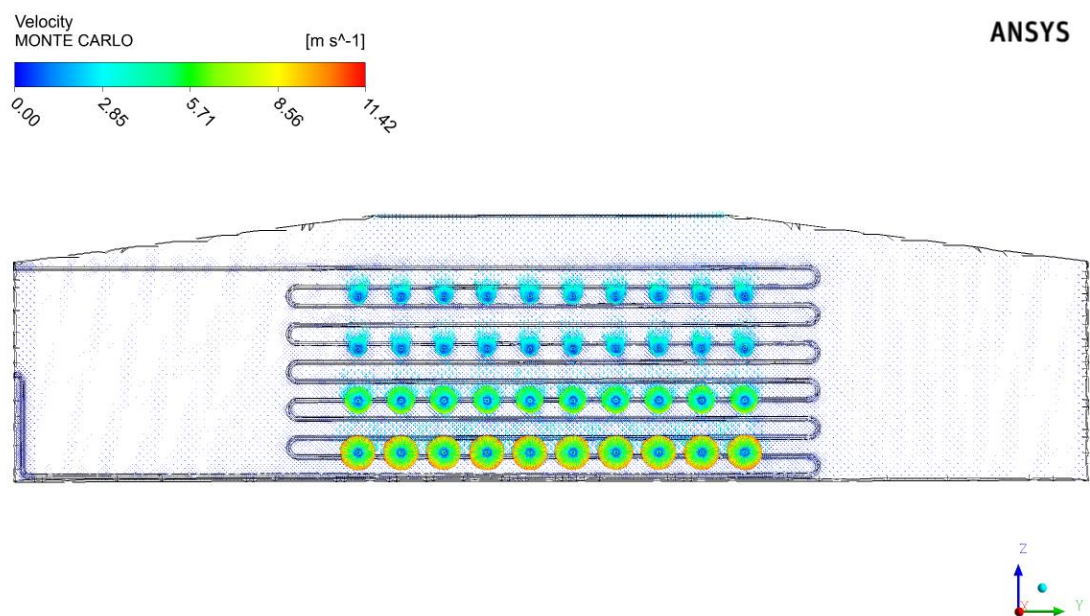


**Figura 6.3.7:** Vetores de velocidade para o modelo DTM.



As Figuras 6.3.5, 6.3.6 e 6.3.7 apresentaram as mesmas semelhanças, as diferenças de potência de cada fileira de queimadores, onde os queimadores da base são os mais potentes do que os queimadores superiores, com as tonalidades vermelhas. As potências elevadas favorecem ao aumento das velocidades dos reagentes e produtos da combustão, fazendo com que a intensidade do escoamento turbulento aumente.

**Figura 6.3.8:** Vetores de velocidade para o modelo Monte Carlo.

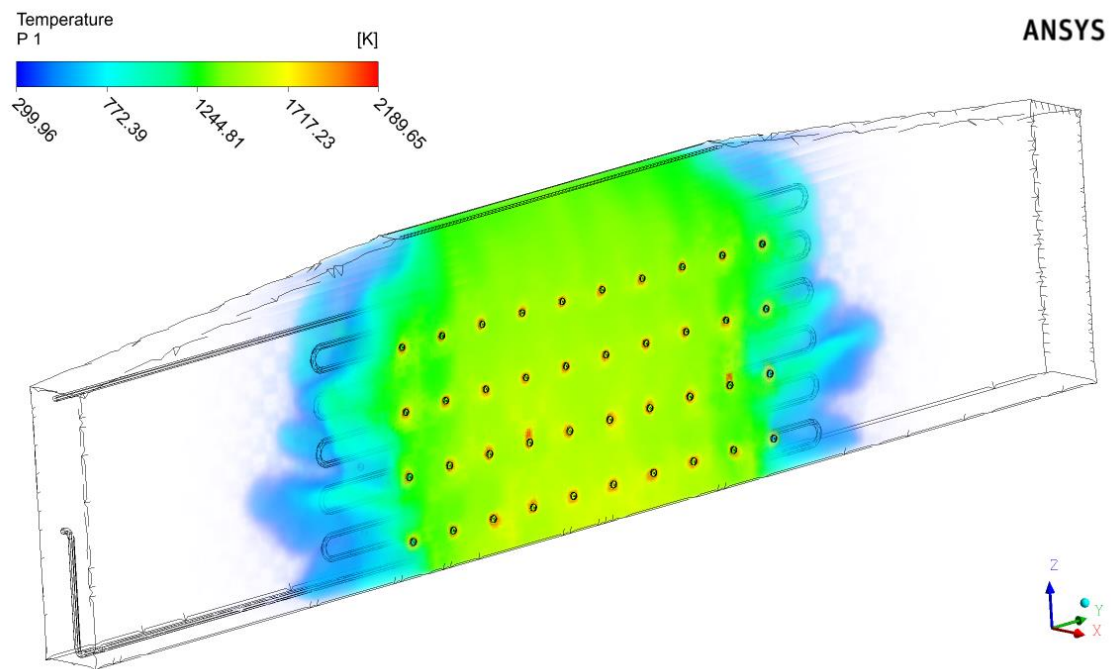


A Figura 6.3.8 mostrou que nos queimadores há saída dos produtos da combustão, porém com uma velocidade muito baixa do que o determinado e apresentou as diferenças de potência de cada fileira de queimadores, onde os queimadores da base são os mais potentes do que os queimadores superiores, mas não conseguiu representar o escoamento turbulento.

### 6.3.3. Temperatura

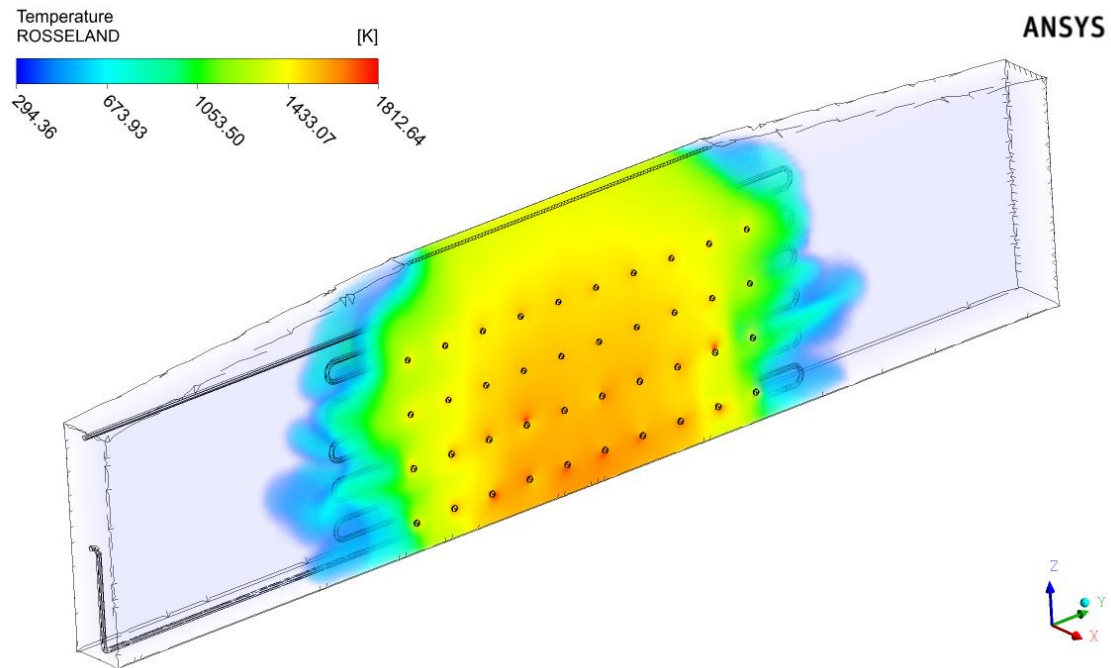
A temperatura é umas das variáveis mais importantes para o controle do processo, portanto, é fundamental visualizar essa variável dentro do equipamento, com vistas a se identificar qual o ponto ótimo de localização dos instrumentos medidores de temperatura. Observa-se nas Figuras 6.3.9 a 6.3.11 que o ponto de localização dos instrumentos de temperatura no equipamento industrial é nas zonas frias das alças do reator tubular. Isso significa que eles não medem a real temperatura na maior parte do equipamento. A indicação de localização ótima seria na segunda coluna de queimadores, independente do lado, porque a partir da segunda coluna para o centro do forno, a temperatura vai ficando mais uniforme, isso vai depender da resistência do material do instrumento.

**Figura 6.3.9:** Temperatura para o modelo P1.



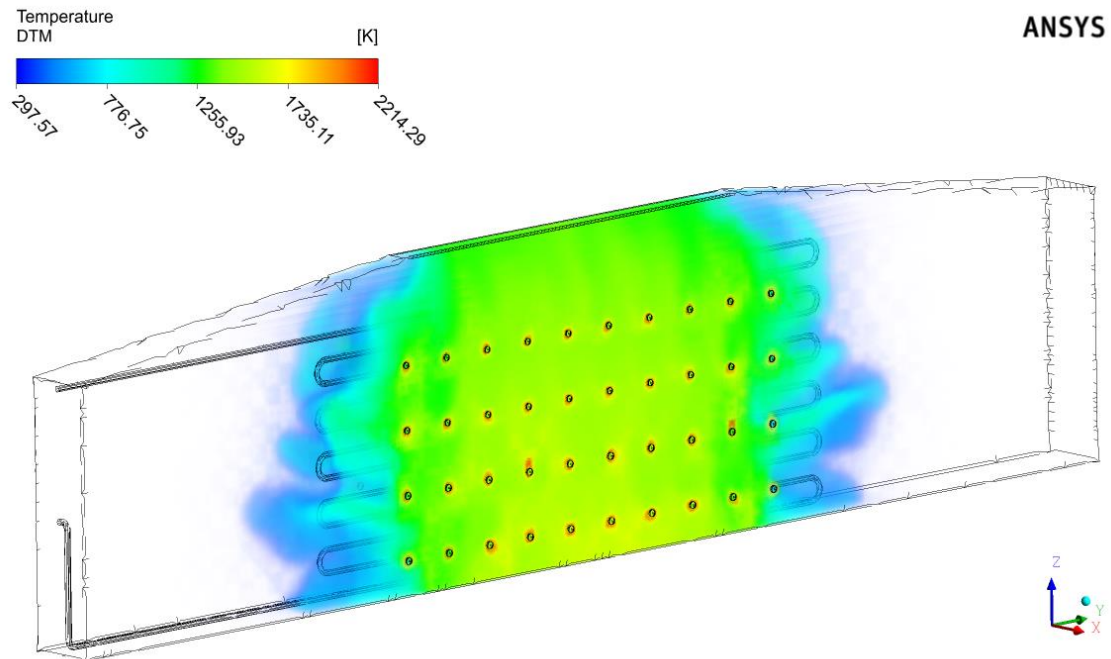
A Figura 6.3.9 mostra que as paredes do forno, onde estão localizados os queimadores, tiveram temperatura elevadas na formação da chama, porém à medida que se localiza o centro do forno a temperatura diminui pouco e se mantém uniforme. Na extremidade do reator essa temperatura diminui e se propaga de uma forma pouco uniforme e tendo um alcance maior nas tubulações centrais do reator.

**Figura 6.3.10:** Temperatura para o modelo Rosseland.



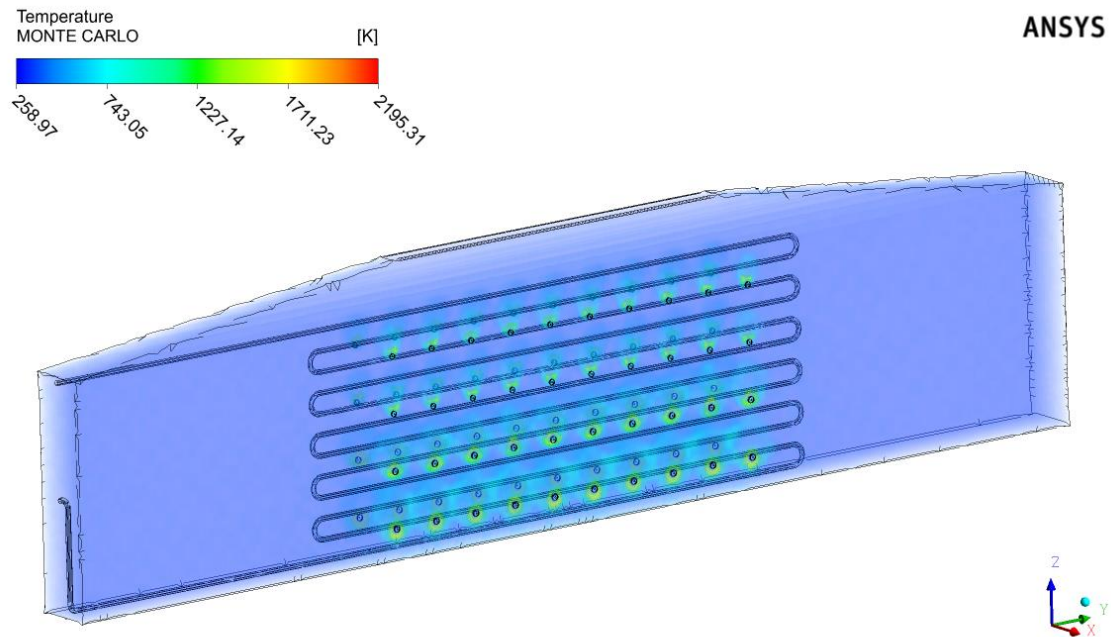
A Figura 6.3.10 apresenta que as paredes do forno, onde estão localizados os queimadores, tiveram temperatura elevadas na formação da chama, mas não tão alta. Porém à medida que se localiza o centro do forno a temperatura diminui e não conseguindo manter a uniformidade. Na extremidade do reator essa temperatura diminui e se propaga de uma forma não uniforme.

**Figura 6.3.11:** Temperatura para o modelo DTM.



A Figura 6.3.11 mostra que as paredes do forno, onde estão localizados os queimadores, tiveram temperatura elevadas na formação da chama, porém à medida que se localiza o centro do forno a temperatura diminui pouco e se mantém uniforme. Na extremidade do reator essa temperatura diminui e se propaga de uma forma não uniforme e tendo um alcance maior nas tubulações centrais do reator.

**Figura 6.3.12:** Temperatura para o modelo Monte Carlo.

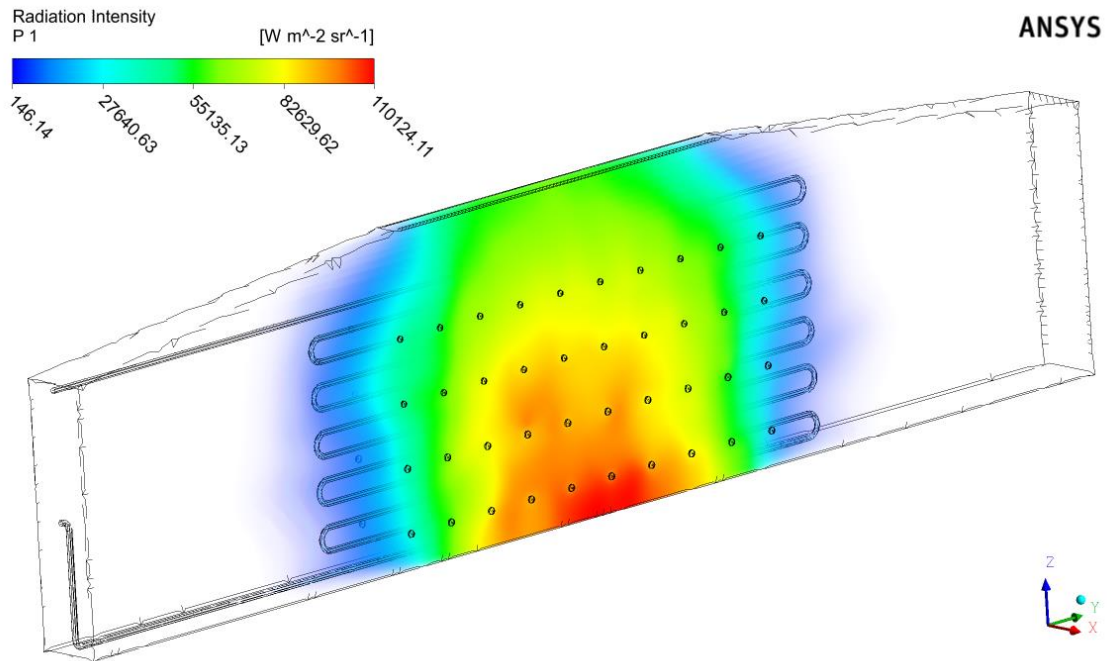


A Figura 6.3.12 apresenta que as paredes do forno, onde estão localizados os queimadores, tiveram temperatura um pouco elevada mostrando a formação da chama, porém não consegue ter o mesmo gradiente de temperatura para chegar na região central do forno.

#### 6.3.4. Intensidade de radiação

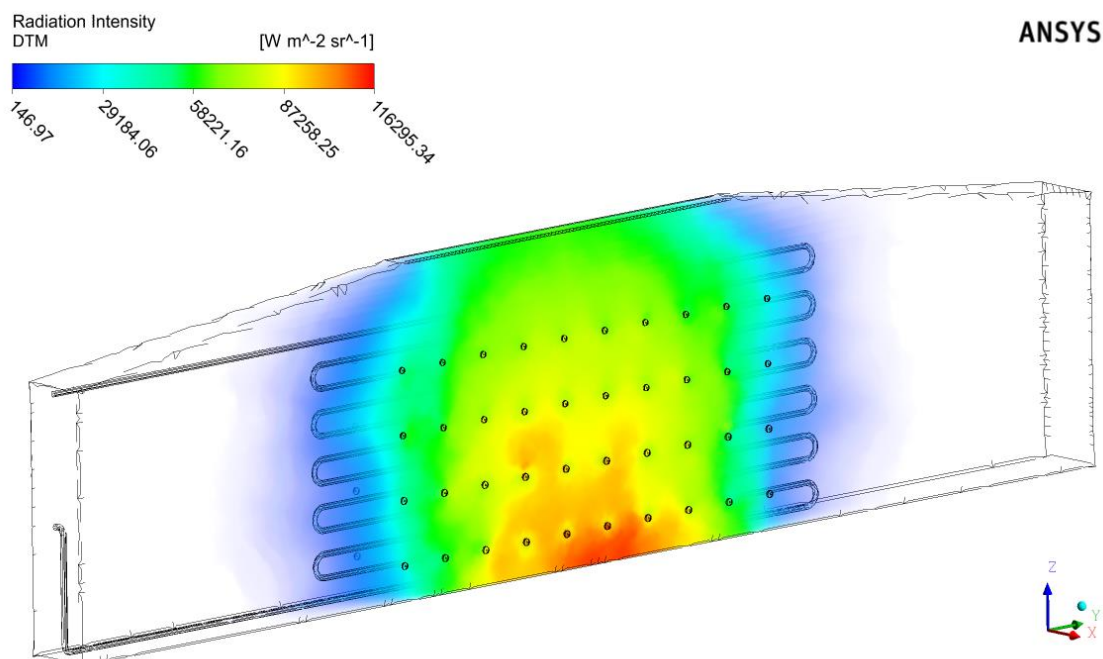
A intensidade de radiação é uns dos indicativos para a variável de temperatura onde a forma de transferência de calor é por radiação. Essa variável é um indicador para a propagação do calor, visando isso, é importante compreender onde o calor terá mais intensidade. Dos modelos de radiação estudados, apenas o modelo de Rosseland não fornece a variável da intensidade de radiação. Nas Figuras 6.3.13e 6.3.14 também são fundamentais para definir os pontos ótimos para os instrumentos de medição, observando que na base central do equipamento é onde encontram-se as maiores intensidades de radiação, com exceção do modelo Monte Carlo, por não desenvolver o escoamento adequado para o sistema.

**Figura 6.3.13:** Intensidade de radiação para o modelo P1.



A Figura 6.3.13 mostra que no centro da parte inferior do forno de craqueamento é onde ocorrem os maiores valores de intensidade de radiação, conseqüentemente, é onde há as temperaturas mais elevadas do equipamento. Existe uma maior uniformidade na parte central do equipamento e à medida que aproxima-se da extremidade com a forma de um arco a intensidade de radiação diminui.

**Figura 6.3.14:** Intensidade de radiação para o modelo DTM.



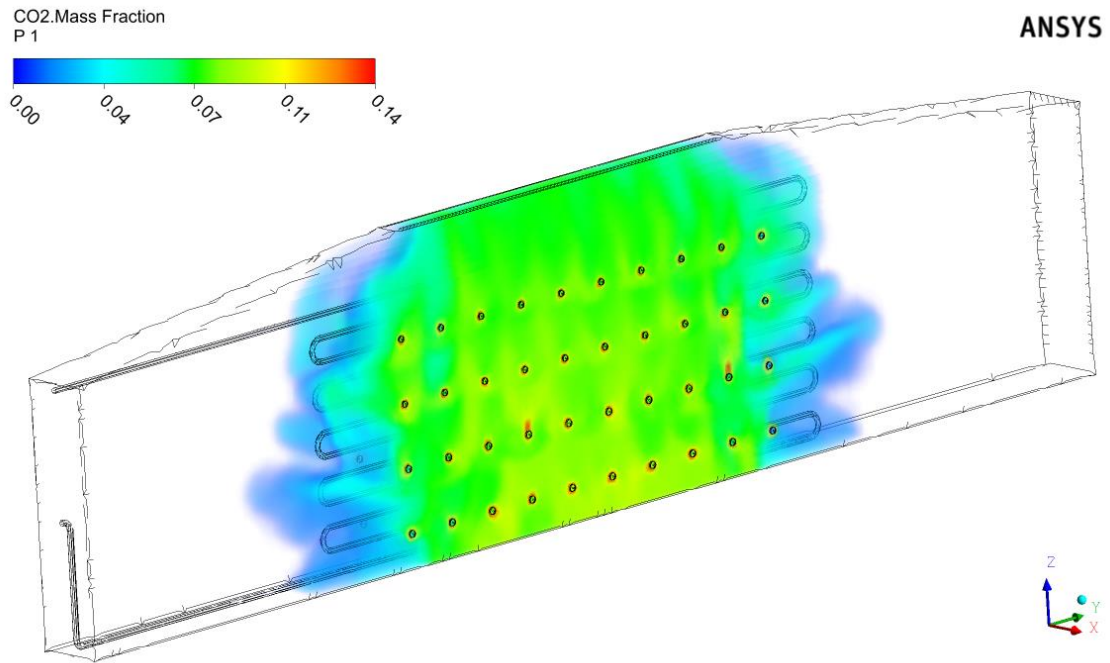
A Figura 6.3.14 apresentou uma intensidade de radiação um pouco menor do que na base do centro, onde encontram-se os maiores valores e propagam-se para suas extremidades de uma forma uniforme, porém com valores menores.

#### 6.3.5. Fração mássica de $CO_2$

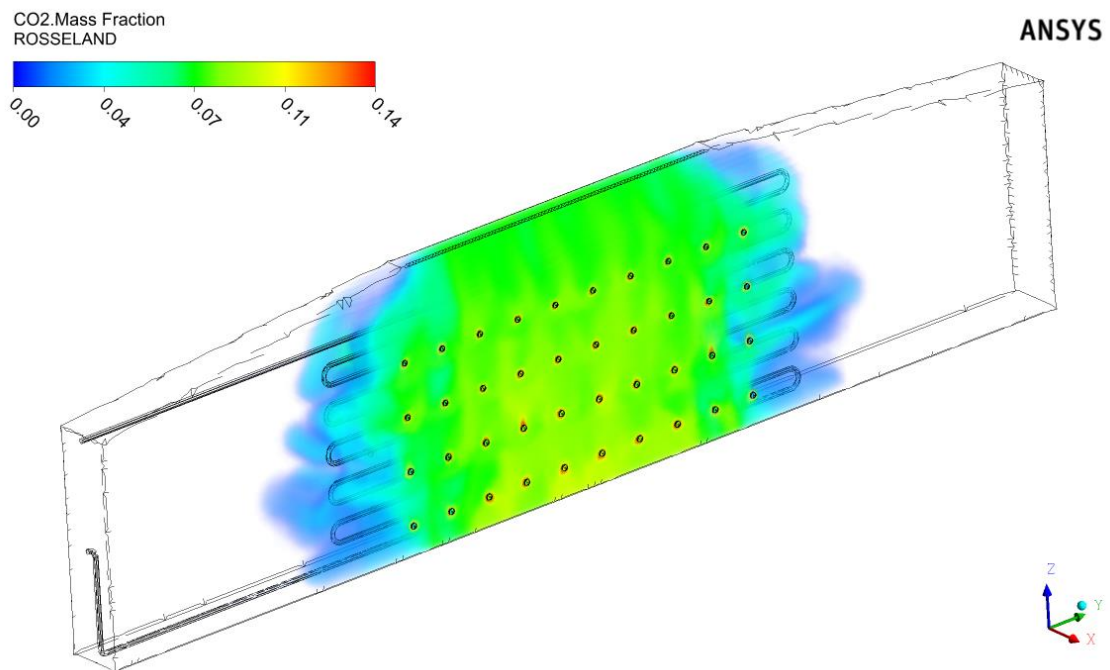
O  $CO_2$  é um dos produtos da reação de combustão gerada da queima do metano com o ar atmosférico. Conhecer a composição desse gás nos gases de combustão é importante para a realização do balanço material que permite o cálculo da vazão total de gases que serão escoados para a seção de convecção, disponibilizando calor para aquecer diversos economizadores que são alocadas nessa seção com vistas à otimização energética da planta.

As Figuras 6.3.15 a 6.3.18 mostram fração mássica média de  $CO_2$  em torno de 0,07 e máxima de 0,14 para os modelos P-1 (Figura 6.3.15), Rosseland (Figura 6.3.16) e DTM (Figura 6.3.17). Como os três modelos, o mesmo modelo para a combustão, Eddy-Dissipation (Seção 3.7.3.1), era de se esperar os mesmos resultados. Porém, o uso do modelo de Monte Carlo (Figura 6.3.18) não calculou uma combustão aceitável e, conseqüentemente, uma pequena formação do gás carbônico. Isto aconteceu pela velocidade do escoamento na entrada do forno, ocorrendo pelo modelo ser estatístico.

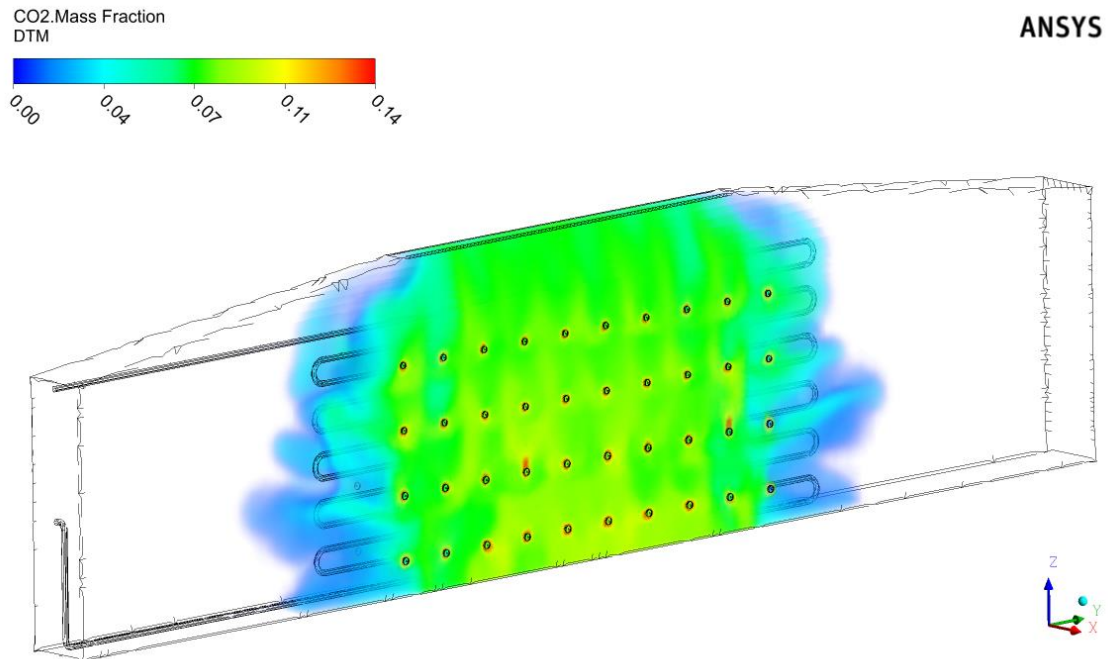
**Figura 6.3.15:** Fração mássica de CO<sub>2</sub> para o modelo P1.



**Figura 6.3.16:** Fração mássica de CO<sub>2</sub> para o modelo Rosseland.

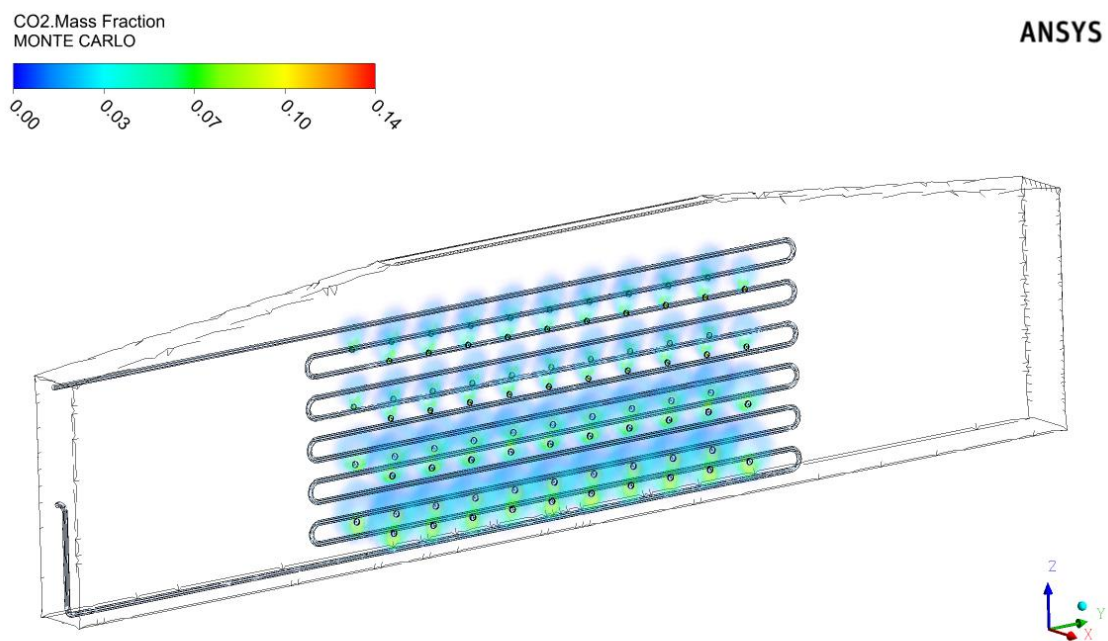


**Figura 6.3.17:** Fração mássica de CO<sub>2</sub> para o modelo DTM.



As Figuras 6.3.15, 6.3.16 e 6.3.17 mostram pouca formação de CO<sub>2</sub>, não passando de 0,14 de sua fração, no instante que ocorre a reação de combustão, mas com predominância de um valor aproximando de 0,07 ao longo do centro do forno.

**Figura 6.3.18:** Fração mássica de CO<sub>2</sub> para o modelo Monte Carlo.



A Figura 6.3.18 apresentou quantidades pequenas na formação de gás carbônico, e a medida que entrava no forno, a concentração do gás carbônico diminuía.

#### **6.4. Considerações Finais**

O trabalho apresentou três etapas para obter os resultados para os fenômenos que existem no forno de craqueamento térmico 1,2-dicloroetano.

Primeiro, a escolha da malha para estudo com CFD, porque foi nela onde os cálculos envolvendo CFD foi solucionado. No trabalho foi escolhido uma malha intermediária, onde conseguiu-se resultados próximos em menos tempo do que uma malha muito maior.

A segunda etapa, foi para validar os dados industriais com os 4 modelos de radiação em estudo (P1, Rosseland, DTM e Monte Carlo), onde foi possível obter dois modelos de radiação (P1 e DTM) que se destacaram com os menores erros relativos do que os outros modelos (Rosseland e Monte Carlo)

O último ponto foi entender os fenômenos, fazendo uma análise das variáveis que influenciam a temperatura no reator tubular e então, observou-se os motivos dos modelos não conseguirem uma temperatura tão próxima dos dados de campo.

## 7. CONCLUSÕES

A simulação da sessão de radiação do forno de craqueamento de 1,2-dicloroetano através do uso da metodologia CFD (Computational Fluid Dynamics) demonstra grande potencial para uso em otimização de processo e indicação de ponto ótimo de alocação de medidores de temperatura.

A análise dos resultados sugere que a localização dos medidores de temperatura nas curvas externas das serpentinas do reator, com está em campo, não é o ideal, tendo em vista que os instrumentos deveriam ficar mais próximos da segunda coluna dos queimadores.

As temperaturas calculadas apresentaram desvio relativo máximo de 32% em relação às medidas de campo do forno industrial. Esse desvio é perfeitamente aceitável tendo em vista que houve simplificações na geometria dos queimadores e o combustível foi considerada uma substância pura.

A malha de 5,4 milhões de elementos mostrou-se a mais adequada para o equipamento analisado, enquanto os modelos de transferência de calor por radiação que geraram resultados mais próximos dos dados industriais, isto é, com menores erros relativos entre 17% a 32% foram os modelos P1e DTM. Os modelos de Rosseland e Monte Carlo mostraram-se inadequados para o estudo, apresentando erros relativos muitos altos com relação aos dados industriais, entre 43% a 83%.

Por fim, a investigação quantitativa e a análise gráfica qualitativa de variáveis de processo, tais como temperatura, intensidade de radiação, velocidade dos gases da reação de combustão e concentração de CO<sub>2</sub>, demonstra um uso potencial para os setores de engenharia e de operação, por representar os fenômenos envolvidos e prever valores de variáveis importantes para o forno de craqueamento térmico de 1,2-dicloroetano.

## 8. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Para a continuidade do trabalho sobre simulação de fornos de craqueamento de 1,2-dicloroetano utilizando a fluidodinâmica computacional, são propostas as seguintes análises com o intuito de dar continuidade à pesquisa atual:

- Realizar simulações em 3D utilizando a simetria, e em 2D, com a finalidade de reduzir o esforço computacional.
- Utilização de outros modelos de escoamentos turbulentos, a fim de estudar a sua adequação ao sistema estudado.
- Utilização de outros modelos de combustão, com a mesma finalidade de se entender a influência desses modelos no comportamento da simulação.
- Ter um detalhamento maior na geometria dos queimadores do forno de craqueamento.
- Incluir a reação química do EDC para MVC que ocorre no reator tubular, para expandir a abrangência do estudo.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABIQUIM. Disponível em: <<https://www.abiquim.org.br>>. Acesso: 30/01/2018.

ALENCAR, H. S. **Estudo da Termo-Aerodinâmica de Câmaras de Combustão para Turbina à Gás: Aplicação ao caso de Micro Turbinas**. Tese de Doutorado. Universidade Federal de Itajubá, Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Itajubá – MG, 2007.

ANSYS, **CFX-Solver Theory Guide**, ANSYS Inc., Canonsbourg, PA, USA, 2016.

BASTOS, J. C. S. **Simulação do Escoamento Gás-Sólido em um Duto Cilíndrico Vertical em Leito Fluidizado Rápido Aplicando a Técnica CFD**. Dissertação de Mestrado. Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, Campinas – SP, 2005.

BEZERRA, Y. S. F. **Análise da formulação em Monte Carlo dos pacotes de energia multiespectrais aplicada a meios constituídos por vapor d'água**. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Faculdade de Engenharia Mecânica. Natal – RN, 2014.

BINELI, A. R. R. **Simulação Numérica CFD no Processo de Têmpera**. Dissertação de Mestrado. Universidade de Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, Campinas – SP, 2009.

BRASKEM. **O Setor Petroquímico**. Disponível em: <<http://www.braskem.com.br/cms/RI/Compartilhar/Pdf?titulo=o-setor-petroquimico&url=pXO82E6OuVTBfQr/94pCo2mOTgPZ+250ymY9BCVzFnJmdnhi61uoaa1y7KVIuVcGmWW/XBkc8cM>>. Acesso: 02/10/2016.

ÇENGEL, Y.; CIMBALA, J. **Mecânica dos Fluidos: Fundamentos e Aplicações**. The McGraw-Hill Companies, Inc, Porto Alegre, 2007.

DETEMMERMAN, T; FROMENT, G. F. **Three dimensional coupled simulation of furnaces and reactor tubes for the thermal cracking of hydrocarbons**. Revue de I Institut Français du Pétrole, v.53, p. 181-194, 1998.

DIAS, D. B. **Avaliação de Técnicas de Fluidodinâmica Computacional em Ciclones**. Dissertação de Mestrado. Universidade de Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, Campinas – SP, 2009.

DONOSO, J. P. **Transferência de Calor por Radiação**. São Paulo, SP: IFSC–USP, 2008. (Apostila)

FANG, Z.; QIU, T.; ZHOU, W. **Couple simulation of recirculation zonal firebox model and detailed kinetic reactor model in an industrial ethylene cracking furnace**, Chinese Journal of Chemical Engineering, v.25, p. 1091-1100, 2017.

GARCEZ, L. R. **Investigação de Métodos Geradores de Malhas Aplicados a Geometrias Típicas das Seções Transversais de Cabos Umbilicais e Tubos Flexíveis**. Dissertação de Mestrado. Universidade de São Paulo, Escola Politécnica São Paulo– SP, 2017.

GHASHGHAEE, M.; KARIMZADEH, R. **Dynamic modeling and simulation of steam cracking furnaces**. Wiley-VCH, v.30, n.7, p. 835-843, 2007.

GONÇALVES, N. D. F. **Método dos Volumes Finitos em Malhas Não-Estruturadas**. Dissertação de Mestrado. Universidade do Porto. Faculdade de Ciências da Universidade do Porto. Porto, 2007.

HABIBI, A.; MERCI, B.; HEYNDERICKX, G. J. **Impact of radiation models in CFD simulations of steam cracking furnaces**. Computers and Chemical Engineering, v. 31, p. 1389-1406, 2007.

HASSAN, G.; POURKASHANIAN, M.; INGHAM, D.; MA, L.; NEWMAN, P.; ODEDRA, A. **Predictions of CO and NO<sub>x</sub> emissions from steam cracking furnaces using GRI2.11 detailed reaction mechanism – A CFD investigation**. Computers and Chemical Engineering, v. 58, p 68-83, 2013.

HEYNDERICKX, G. J.; FROMENT, G. F. **Simulation and comparasion of the run length of an ethane cracking furnace with reactor tubes of circular and elliptical cross sections**, Industrial and Engineering Chemistry Research, v.37, p. 914-922, 1998.

HU, G.; WANG, H.; QIAN, F.; VAN GEEM, K.M.; SHIETEKAT, C. M.; MARIN, G. B. **Coupled simulation of an industrial naphtha cracking furnace equipped with long-flame and radiation burners**. Computers and Chemical Engineering, v. 38, p. 24-34, 2012.

HU, G.; SCHIETEKAT, C. M.; ZHANG, Y.; QIAN, F.; HEYNDERICKX, G.;VAN GEEM, K. M.; MARIN, G. B. **Impact of radiation models in coupled simulations of steam cracking furnaces and reactors**. Industrial& Engineering Chemistry Research, v.54, p. 2453-2465, 2015.

HU, G.; YUAN, B.; ZHANG, L.; LI, J.; DU, W.; QUIAN, F. **Coupled simulation of convection section with dual stage steam feed mixing of an industrial ethylene cracking furnace**. Chemical Engineering Journal, v.286, p. 436-446, 2016.

IHS Markit. Disponível em: <<https://ihsmarkit.com/>>. Acesso: 30/06/2018.

INCROPERA, F.; DEWITT, D. **Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa**, 7 Ed, LTC, Rio de Janeiro, 2014.

KREITH, F.; BOHN, M. **Princípios de Transferência de Calor**, Thomson Learning, São Paulo, 2003.

LI, X.; ZHANG, L.; SUN, Y.; JIANG, B.; LI, X.; WANG, J. **Numerical simulation of the flue gas side of refining vacuum furnace using CFD**. Chemical Engineering Science, v. 123, p. 70-80, 2015.

LIU, B.; WANG, Y.; XU, H. **Mild combustion in forward flow furnace of refinery-off gas for low-emissions by deflector**. Applied Thermal Engineering, v.91, p. 1048-1058, 2015.

MAITELLI, C. **Simulação do escoamento monofásico em um estágio de uma bomba centrífuga utilizando técnicas de fluidodinâmica computacional**. Tese de Doutorado.

Universidade Federal do Rio Grande do Norte. Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Petróleo. Natal, RN, 2010.

MARINHO, I. V. B.; PINTO, J.C.; NOGUEIRA, E.S. **Multiphase Computational Fluid Dynamics Simulation as a Tool for Planning Emergencies with Chemical Agents**. Revista Virtual Química, v.6, n.3, p.785-814, 2014.

MODEST, M. **Radiative Heat Transfer**, 2 Ed, Elsevier Science, USA, 2003.

OLIVEIRA, L. M. T. M. **Modelagem e Simulação da Recuperação Secundária em Reservatórios de Petróleo Utilizando Configuração Five-Spots**. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal de Alagoas. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química. Alagoas, AL, 2015.

OLIVEIRA, T. C. L.; PEREIRA NETO, A. T.; ALVES, J. J. N.; MORAIS JR. A. **A.CFD Simulation of an industrial reactor for thermal cracking of 1,2-dichloroethane**. Brazilian Journal of Chemical Engineering, v.34, p. 541-555, 2017.

OLIVEIRA JR, J. **Modelagem e Simulação de Fornos de Craqueamento de 1,2-Dicloroetano: Determinação da Conversão**. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal de Campina Grande. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química. Campina Grande, PB, 2008.

OZISIK, M. N. **Heat Transfer: A Basic Approach**. The McGraw-Hill Companies, Inc, USA, 1990.

PASSOS, C; *et al.* **Introdução a Refino**. Rio de Janeiro, 2002. (Apostila)

PINHEIRO JR, J. **Estudo Numérico de uma Câmara de Combustão de Microturbina a Gás de Baixa Emissão de Poluentes**. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal de Brasília. Programa de Pós-Graduação em Ciências Mecânicas. Brasília, DF, 2010.

QIAN, J. L. **Tubular Heating Furnace**, China Petrochemical Press, Beijing, 2003.

RAJAN, G.G. **Optimizing Energy Efficiencies in Industry**, USA: McGraw Hill, 2002, p. 12-13.

REYNIERS, G.C.; FROMENT, G. F.; KOPINKE, F. D.; ZIMMERMANN, G. **Coke formation in the thermal cracking of hydrocarbons 4. Modeling of Coke Formation in Naphtha Cracking**. Industrial and Engineering Chemistry Research, v.33, p. 2584-2590, 1994.

RONCHETTI, B. **Simulação Numérica da Combustão de Metano em Câmara Cilíndrica Utilizando o CFX 10.0**. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre – RS, 2008.

SANTAMOURIS, M.; WOUTERS, P. **Building Ventilation**. the state of the art. London: Earthscan, 2006.

SCHIRMEISTER, R., KAHSNITZ, J., TRAGER, M. **Influence of EDC Cracking Severity on the Marginal Costs of Vinyl Chloride Production**. Industrial & Engineering Chemistry Research. 2009.

SHEN, X.; ZHANG, G.; BIERG, B. **Comparison of Different Methods for Estimating Ventilation Rates Through Wind Driven Ventilated Buildings.** Energy and Buildings, v. 54, p. 297- 306, 2012.

SILVA, C.V., **Simulação numérica da combustão turbulenta de gás natural em câmara cilíndrica.** Tese de Doutorado. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Porto Alegre, RS, 2005.

SOUZA, R. **Escoamento Bifásico Líquido-Gás: Previsão de Gradientes de Pressão com a Correlação de Lockhart & Martinelli e Fluidodinâmica Computacional.** Projeto de Graduação. Universidade Federal do Rio de Janeiro. Escola de Química. Rio de Janeiro, RJ, 2009.

TELEKEN, J. G. **Análise da Fluidodinâmica do Prato Perfurado de uma Unidade Piloto de Destilação.** Dissertação de Mestrado. Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química. Florianópolis, SC, 2009.

TORRES, E. M. M. **A evolução da indústria petroquímica brasileira.** Química Nova, vol. 20, p. 49-54, 1997.

URNS, S. R. **An Introduction to Combustion: Concepts and Applications,** McGraw-Hill, USA, 2000.

VANDEWALLE, L. A.; VAN CAUWENBERGE, D. J.; DEDEYNE, J. N.; VAN GEEM, K. M.; MARIN, G.B. **Dynamic simulation of fouling in steam cracking reactors using CFD.** Chemical Engineering Journal, v. 329, p 77-87, 2017.

VENSON, G. G. **Desenvolvimento de um Banco de Ensaios e da Metodologia Experimental para o Levantamento das Características Operacionais de Turbo compressores Utilizando Gás Quente.** Dissertação de Mestrado. Universidade Federal de Minas Gerais. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica. Belo Horizonte, MG, 2007.

VERCAMMEN, H. A. J; FROMENT, G. F. **An improved zone method using Monte Carlo techniques for the simulation of radiation in industrial furnaces.** International Journal of Heat and Mass Transfer, v. 23, p. 329-337, 1980.

VIANNA JR., A. S.; SIQUEIRA, F. C. S.; RADUSWESKI, L.; LIMA, A. L. S. **CFD and Chemical Defense.** Revista Virtual Química, v.6, n.3, p.815-832, 2014.

ZHANG, N.; QIU, T.; CHEN, B. **CFD simulation of propane cracking tube using detailed radical kinetic mechanism.** Chinese Journal of Chemical Engineering, v. 21, p. 1319-1331, 2013.

ZHENG, S.; ZHANG, X.; QI, C.; ZHOU, H. **Modeling of heat transfer and pyrolysis reactions in ethylene cracking furnace based on 3-D combustion monitoring.** International Journal of Thermal Sciences, v.94, p. 28-36, 2015.

## APÊNDICE I

- ❖ MOREIRA, T. S.; OLIVEIRA JR. J. M.; MARINHO, J. L. G; VIANNA, R. F.; **Estudo de Diferentes Modelos de Radiação em um Forno de Craqueamento Térmico na Influência da Temperatura na Superfície do Reator Tubular Utilizando a Fluidodinâmica Computacional.** III Congresso Nacional de Engenharia de Petróleo, Gás e Biocombustíveis (CONEPETRO), 2018.
  
- ❖ MOREIRA, T. S.; OLIVEIRA JR. J. M.; MARINHO, J. L. G; VIANNA, R. F.; **Influência da Radiação na Temperatura de um Forno de Craqueamento Térmico Utilizando a Fluidodinâmica Computacional.** XI Congresso de Engenharia, Ciência e Tecnologia. (CONNECTE), 2018.
  
- ❖ MOREIRA, T. S.; OLIVEIRA JR. J. M.; MARINHO, J. L. G; VIANNA, R. F.; **Análise Fluidodinâmica da Combustão em um Forno de Craqueamento Térmico Utilizando o Software CFX.** 9º Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo e Gás. (PDPetro), 2017.