



ANÁLISE EM CFD DE EM UMA CÂMARA DE COMBUSTÃO DE UM FORNO DE DESTILAÇÃO ATMOSFÉRICA DE PETRÓLEO

Peterson Machado de Oliveira¹, Cristiano Vitorino da Silva² and Flávia S. F. Zinani¹

¹ Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade do Vale do Rio dos Sinos, São Leopoldo, RS, Brasil.

² Departamento de Engenharias e Ciência da Computação, Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões – URI, Erechim, RS, Brasil.

e-mail: fzinani@unisinors.br

Resumo: Durante a etapa de projeto de fornos de unidades de destilação são definidos limites para as temperaturas dos tubos da serpentina de aquecimento de petróleo a fim de garantir sua integridade estrutural. Como estes equipamentos operam por anos estão sujeitos a sofrer modificações no projeto original, é necessário também que hajam ferramentas capazes de se adaptar e identificar os efeitos destas mudanças. No intuito de avaliar as condições de operação de uma fornalha de uma destas unidades de destilação, neste trabalho realiza-se uma avaliação numérica em CFD - Computational Fluid Dynamics através do software Ansys CFX, onde a modelagem do escoamento reativo não isotérmico é implementada para simular o processo de combustão e transferência de calor no interior do forno. Dois modelos de combustão foram comparados, o WD1, considerando o combustível como gás natural e sua reação de oxidação em etapa única, e o WD2 considerando combustão do metano em duas etapas globais. A modelagem teve como base a solução das equações de conservação de massa, quantidade movimento, energia, considerando a radiação térmica, e espécies químicas. Para avaliar o fluxo médio de calor para o petróleo foi utilizado o software comercial HTRI Xfh 6.0. Como principais resultados tem-se a distribuição de temperaturas no interior do forno e a transferência de calor promovida pela combustão. Observa-se que o modelo WD2 é mais adequado para representar o problema.

Palavras-chave: Fornos, Tubos, Combustão, CFD.

1. INTRODUÇÃO

A vida útil de fornos de unidades de destilação de petróleo depende diretamente da integridade estrutural dos tubos que compõem a serpentina de aquecimento de carga. Por esta razão muito foi desenvolvido em termos de métodos que seja possível determinar o perfil de temperaturas no interior das câmaras de combustão e o desempenho destes equipamentos.

O primeiro método matemático desenvolvido para a avaliação de projeto de fornos foi apresentado por Lobo e Evans (1939), baseado em dados empíricos, utilizava um coeficiente de troca de calor por convecção fixo à toda a serpentina e considerava a temperatura uniforme para os gases de combustão. Mas conforme Lobo (1974) este método fora desenvolvido para fornos de um formato específico denominado *well-stired box*. Mais tarde Hottel (1974) propôs o método de multi-zonas. Neste método o equipamento é dividido em zonas com propriedades iguais, havendo necessidade de simplificações em função de singularidades, tais como os tubos, que precisam ser representados como uma área plana no interior do equipamento; as características termodinâmicas no interior da câmara; e o padrão de combustão da chama, que precisam ser conhecidos (obtidos empiricamente). Este método é empregado até hoje é uma das bases que softwares comerciais utilizados para estudo de performance na operação de fornos, conforme apresentam Diaz e Castro (2010).

Juntamente com o método multi-zonas, a maioria dos softwares comerciais se utiliza da metodologia disponível na norma API STD 530 (2008) para determinar os picos de transferência de calor a partir da aplicação de fatores de correção sobre o fluxo médio para os tubos. Estes fatores são a posição dos tubos no interior da câmara de combustão e o fator circunferencial (relação da distância entre centros e o diâmetro externo dos tubos).

Apesar destes softwares dedicados ao estudo de performance de fornos poderem ser adaptados a diversos modelos destes equipamentos, sua programação restringe-se as análises de algumas condições pré-estabelecidas, como tipo e formato do forno, número de queimadores e disposição dos tubos, por exemplo. A falta de flexibilidade na criação de modelos e o surgimento da dinâmica dos fluidos computacional (CFD), aliada ao avanço da capacidade de processamento dos computadores, tem contribuído para tornar estes métodos obsoletos.

Na indústria petroquímica a técnica CFD tem se tornado uma ferramenta poderosa e eficaz na compreensão de diversos processos e em estudos de engenharia. Com a simulação dos processos de combustão é possível obter uma base teórica para o comportamento dos campos de temperatura, de concentrações de espécies químicas e de velocidade dos gases de combustão no interior da câmara de um forno em diferentes aplicações. Fornos de unidades de craqueamento tem sido largamente simulados com auxílio de CFD a algum tempo como nos trabalhos de Heynderickx et al. (2001), Oprins and Heynderickx (2003), Stefanidis et al. (2006), Habibi, Merci e Heynderickx (2007), Arrieta, Cadavid e Amell (2011) que tiveram como foco o estudo dos mecanismos de combustão e radiação. Diaz e Castro (2010) dedicaram um trabalho voltada à simulação das temperaturas de tubos com a modelagem em CFD em fornos de unidades de destilação obtendo resultados de maior precisão do que os encontrados em software dedicado, sem a necessidade simular o escoamento de petróleo.

O processo de escoamento que ocorre no interior dos tubos da serpentina não será estudado neste trabalho. O petróleo é composto por uma mistura de hidrocarbonetos denominados pseudocomponentes ou cortes, com diferentes pontos de ebulição, portanto ele

vaporiza à medida que é aquecido, gerando um escoamento bifásico, este tipo de escoamento tornaria a simulação desnecessariamente mais complexa. Buscando simplificar estes processos, transformando-os em condições de contorno, foi utilizado o software comercial HTRI Xfh para gerar e calcular as propriedades dos pseudo-componentes presentes no petróleo e verificar o fluxo de calor para o fluido pelo método das zonas. Desta maneira, é possível direcionar todo o poder de processamento na simulação de um escoamento reativo e turbulento no interior da câmara de combustão e ainda conseguir verificar a temperatura superficial da serpentina de aquecimento de petróleo.

2. MODELAGEM

Neste trabalho a resolução dos problemas em CFD se utiliza do método de Volumes Finitos (Patankar, 1980) para a resolução numérica de equações diferenciais. Esta técnica consiste em dividir o volume de controle em um número finito de elementos de volume por um processo de geração de malha (*mesh*). As considerações necessárias ao desenvolvimento do modelo utilizado nas simulações foram baseadas nas dimensões, número de tubos e geometria da câmara de combustão de um forno que está em operação na cidade de Canoas-Brasil e foram tomadas como as condições de contorno para a simulação.

O processo da modelagem descrito neste capítulo é dividido em uma etapa da construção da malha, uma síntese das equações necessárias à modelagem dos fenômenos relacionados ao processo de combustão na câmara do forno e por fim o levantamento das condições de contorno baseados em dados da operação do equipamento real. As condições de contorno utilizadas para o processo de modelagem do fluxo de calor para os tubos foram obtidas com auxílio do software HTRI Xfh com dados de um petróleo de Grau API médio.

Durante a etapa de modelagem optou-se por fazer a comparação entre os modelos de combustão WD1, considerando o combustível como gás natural e sua reação de oxidação em etapa única, e o WD2 considerando combustão do metano em duas etapas globais. Assim será verificado se a simulação de fornos das dadas dimensões sofre alterações em virtude do modelo de combustão empregado.

2.1 Criação da malha

A malha desenvolvida para este trabalho é baseada em um forno que opera hoje em uma unidade de destilação atmosférica de petróleo em Canoas-Brasil. Suas dimensões principais podem ser verificadas na Figura 1.

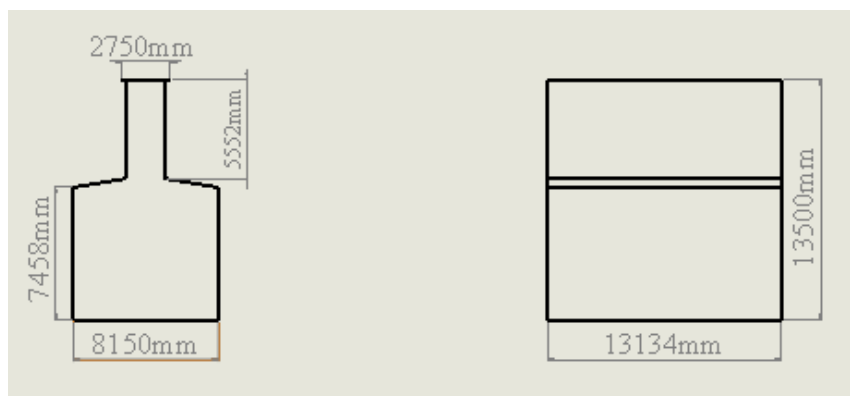


Figura 1: dimensões externas do forno modelado

O forno é dividido em duas câmaras de combustão, cada uma com 15 queimadores que operam simultaneamente e uma única zona de convecção, na parte superior. O forno possui 195 tubos em seu interior, sendo 116 na zona de radiação e 79 em zona puramente convectiva. Cada tubo possui 168,3mm de diâmetro, 8mm de espessura e 13410mm de comprimento. As posições dos tubos podem ser verificadas no desenho em corte do forno da Figura 2.

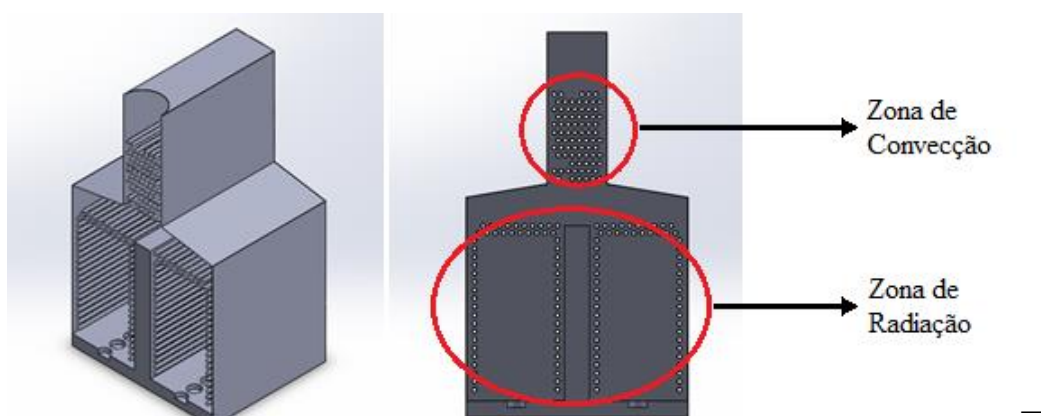


Figura 2: Vistas interna do forno

O refinamento da malha do forno impacta diretamente na qualidade dos resultados da simulação e no tempo de processamento. A zona de radiação precisa ter um bom refinamento de malha, uma vez que junto aos queimadores ocorrem os processos relacionados à combustão além de ocorrer intenso fluxo de calor por radiação e convecção numa região de escoamento altamente turbulento. Para garantir uma boa resolução de malha e também conseguir reduzir esforço computacional optou-se por explorar as condições de simetria do equipamento, reduzindo a geometria a um quarto do domínio. Também não foram considerados os tubos da zona de convecção, e a geometria dos queimadores foi reduzida a entradas de ar e de gás combustível. Diaz e Castro (2010), Arrieta, Cadavid e Amell (2011) e Li et al. (2015) já aplicaram estas simplificações em fornos industriais obtendo bons resultados em comparados aos valores experimentais. As dimensões dos equipamentos estudados justificam estas simplificações. Com as condições de simetria e simplificações, foram simulados 7,5 queimadores e uma câmara de combustão com 58 tubos. As características geométricas como

distâncias entre queimadores e entre tubos foram preservadas durante o desenvolvimento da malha, bem como largura da câmara de combustão.

A malha desenvolvida no trabalho, além de apresentar as simplificações mencionadas acima, possui regiões de maior refinamento em partes do domínio. As regiões nas imediações dos tubos possuem detalhes de geometria reduzidos que demandam uma malha mais refinada, e, por serem 58 tubos de 6567 mm de comprimento o resultado final apresenta um número elevado de volumes de controle. Também foi considerada uma região com 4000 mm de altura acima dos queimadores com maior densidade de volumes de controle, a fim garantir maior precisão nos resultados de cálculos dos processos de combustão. A malha desenvolvida possui $11,8 \times 10^6$ volumes de controle distribuídos em 250000m^3 modelados no software Ansys ICEM CFD 18.1. A Figura 3 mostra a malha com $\frac{1}{4}$ das dimensões do forno e também os tubos no seu interior.

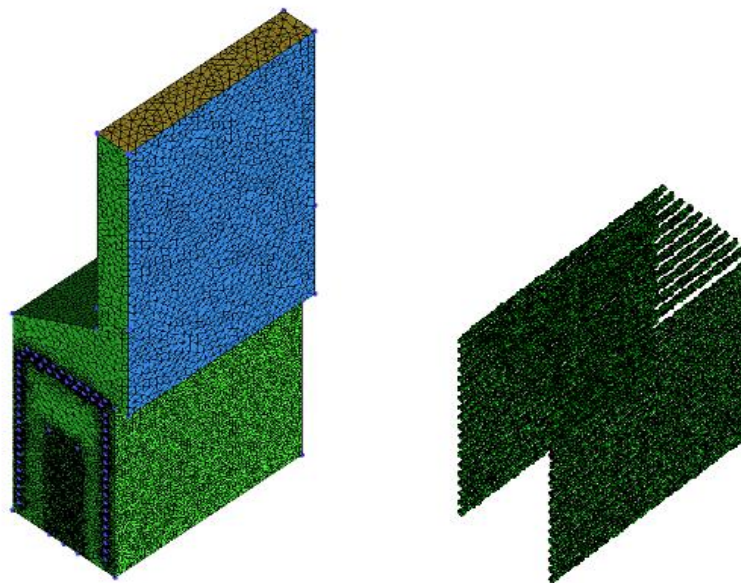


Figura 3: Malha do forno

2.2 Modelagem do Escoamento Turbulento e Reativo

Processos de combustão apresentam características particulares quando se trata do estudo da turbulência. Para a simulação do forno foi utilizado modelo κ - ϵ padrão (Launder e Spaulder, 1974) em conjunto com funções de parede escalonáveis (Ansys, 2015) esta configuração é a mais utilizada conforme vários autores por ser um modelo robusto e de baixo custo computacional. Li et al. (2015) aplicou esta configuração em simulações dos processos de combustão em fornos de unidades de vácuo com software CFX 14.0 obtendo bons resultados predizendo o fluxo de gás no interior destes equipamentos. A simulação, através do método dos volumes finitos, encontra uma solução para o problema da turbulência no interior do equipamento utilizando-se de dois métodos conhecidos, o das médias de Reynolds (RANS – *Reynolds Averaged Navier-Stokes*) e o das médias de Favre.

A média de Reynolds é dada por uma variável ϕ decomposta em uma componente média temporal clássica $\bar{\phi}$ e uma flutuação ϕ' ou seja

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (1)$$

Em chamas turbulentas ocorrem flutuações na massa específica devido à energia térmica liberada, portanto a utilização da média de Reynolds acaba trazendo dificuldades na solução do sistema de equações (Veynante e Verish, 2002). Nestes casos, recomenda-se a adoção das médias de Favre que, por outro lado, é dada por uma variável ϕ decomposta em uma componente da média ponderada pela massa específica $\tilde{\phi}$ e uma flutuação ϕ'' , ou seja

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' \quad (2)$$

onde $\rho\phi'' = 0$.

O processo de combustão na câmara de combustão no forno foi considerado como estacionário, logo as derivadas no tempo foram desconsideradas. Assim, as equações de conservação de massa e de quantidade de movimento ficam respectivamente

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial (\tilde{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \tilde{P}}{\partial x_i} \delta_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) - \overline{\rho u_i'' u_j''} \right] + S_u \quad (4)$$

onde $\tilde{\rho}$ é a massa específica pela média de Reynolds (temporal), $\tilde{u}_i$ é a velocidade média de Favre (ponderada pela massa) na direção i , P é a pressão, μ é a viscosidade absoluta do fluido, δ_{ij} é a função delta de Kronecker e S_u é o termo fonte que foi inserido para modelar forças externas, dentre outros termos matemáticos gerados pela aplicação do modelo de turbulência.

Nesta equação o termo $-\overline{\rho u_i'' u_j''}$, conhecido como tensor de Reynolds, representa as flutuações turbulentas no fluxo médio. Sua modelagem poder ser executada aplicando a hipótese de Boussinesq (Launder e Sandham, 2001). O modelo Boussinesq, partindo da analogia de Stokes para as tensões viscosas moleculares pode ser descrito da seguinte forma

$$-\overline{\rho u_i'' u_j''} = \mu_t \left[\left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right] - \frac{2}{3} \tilde{\rho} k \delta_{ij} \quad (5)$$

onde μ_t é a viscosidade turbulenta e k é energia cinética turbulenta dada por

$$k = \frac{1}{2} (\overline{u_i'' u_i''}) = \frac{1}{2} (\overline{u''^2} + \overline{v''^2} + \overline{w''^2}) \quad (6)$$

O modelo k - ε padrão possui duas equações de transporte, uma para a energia cinética turbulenta (k) e outra para a sua taxa de dissipação (ε). Neste modelo a viscosidade turbulenta é dada por

$$\mu_t = \frac{C_\mu \tilde{\rho} k^2}{\varepsilon} \quad (7)$$

A equação de transporte para a energia cinética turbulenta, k , é dada por

$$\frac{\partial(\rho \tilde{u}_j k)}{\partial x_j} = -\overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] - \bar{\rho} \varepsilon \quad (8)$$

enquanto a equação de transporte para a dissipação cinemática turbulenta fica

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_j \varepsilon)}{\partial x_j} = -C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} \overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - C_{2\varepsilon} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] \quad (9)$$

Para fechamento das equações o modelo $k-\varepsilon$ utilizam-se constantes previamente definidas que seguem na Tabela 1.

Tabela 1. Constantes para o modelo $k-\varepsilon$ padrão proposto por Launder e Spaulding (1974).

Constante	Valor
$C_{1\varepsilon}$	1,45
$C_{2\varepsilon}$	1,9
C_μ	0,09
σ_k	1,0
σ_ε	1,3

2.3 Modelagem da Combustão

O modelo numérico proposto para representar as reações químicas da combustão baseiam-se num processo de combustão de metano não pré-misturado com ar atmosférico nos queimadores do forno. O escoamento no interior do forno é considerado monofásico e o fluido é considerado multicomponente. As reações da combustão foram modeladas usando a combinação dos modelos *EDM* e *FRC* (*Eddy Dissipation* e *Finite Rate Chemistry*, respectivamente) baseado no trabalho de Magnussen e Hjertager (1977). Autores como Guihua et al. (2011), Hu et al. (2011) e Yang et al. (2012) atestaram a eficiência de simulações de modelos turbulentos, embora Li et al. (2015) tenha identificado que o modelo não seja preciso para o cálculo de espécies intermediárias do processo de combustão, como CO e NO.

As equações de transporte que os modelos *EDM* e *FRC* agregam à modelagem são resolvidas utilizando-se do movimento médio do fluido, que tem origem em um único campo de velocidade, temperatura e pressão. Cada componente do fluido influencia as propriedades do meio e possui uma própria equação de conservação de massa, descrita pela notação tensorial sem a dependência do tempo

$$\frac{\partial(\tilde{\rho}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\tilde{\rho}_i (\tilde{u}_{ij} - \tilde{u}_j) - \overline{\tilde{\rho}_i u_j''} \right] + S_i \quad (10)$$

onde $\tilde{\rho}_i$ é a densidade ponderada do componente i da mistura, $\tilde{u}_{ij}$ é a velocidade ponderada do componente i . S_i é o termo fonte para i , incluindo o efeito das reações químicas no balanço de massa da espécie, sendo

$$S_i = \overline{MM}_i \sum_{k=1}^n (\eta_{kl}'' - \eta_{kl}') R_k \quad (11)$$

onde $\overline{MM}_i$ é a massa molecular de i , η' coeficiente estequiométrico do composto i na reação de ida, η'' coeficiente estequiométrico da reação de volta e R_k taxa da reação k .

O primeiro dos dois métodos utilizados para obter a taxa de reação R_k neste trabalho é o modelo *FRC*, cuja a livre tradução do nome é reação por taxas finitas. O cálculo da taxa de reação tendo como base a equação de Arrhenius, ou seja, depende da energia de ativação, sendo descrito por

$$R_k = \left(F_K \prod_{I=A,B,\dots}^{Nc} [I]^{r_{kl}'} - B_K \prod_{I=A,B,\dots}^{Nc} [I]^{r_{kl}''} \right) \quad (12)$$

onde $[I]$ representa a maior concentração molar do componente I e F_K e B_K são as constantes de taxas de avanço e retorno respectivamente, r representa a ordem do componente I na reação elementar k . A ordem da reação é igual ao coeficiente estequiométrico para reações elementares, mas podem ser diferentes em reações globais. As constantes de avanço e retrocesso da reação seguem

$$F_k = A_K T^\beta \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) \quad (13)$$

$$B_k = A_K T^\beta \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) \quad (14)$$

onde A_K é o coeficiente pré-exponencial, β é o expoente de temperatura (adimensional), E_A energia de ativação e T a temperatura absoluta. A_K , β e E_A podem apresentar diferentes valores para as reações de avanço e retorno, dependendo da reação.

O segundo modelo utilizado é EDM, cuja tradução seria modelo de dissipação de vórtices. O tempo de mistura dos componentes é proporcional à relação entre a energia cinética de turbulência (k) e a sua dissipação (ϵ). A taxa de progressão da reação k , é determinada pelo menor valor obtido de duas equações, a primeira relativa ao limitante dos reagentes

$$R_K = A \left(\frac{\epsilon}{\kappa} \right) \min \left(\frac{[I]}{\eta_{k,l}'} \right) \quad (15)$$

onde $[I]$ é a concentração molar do componente I e η_{kl}' contempla apenas os reagentes. A segunda equação diz respeito aos limitantes dos produtos, dada por

$$R_K = AB \left(\frac{\varepsilon}{\kappa} \right) \frac{\sum_P [I] W_I}{\sum_P \eta_{kl}'' W_I} \quad (16)$$

O modelo misto de *EDM* e *FRC* utilizado neste trabalho, utiliza as menores das taxas de reação calculadas pelos dois modelos como R_k (Ansys, 2015).

As reações para a combustão do metano estão presentes nas bibliotecas próprias a este combustível. Os mecanismos de oxidação de metano utilizados no trabalho são Westbrook-Dryer (1981) com um e dois passos, respectivamente WD1 e WD2. A forma como as reações ocorrem nos dois mecanismos pode ser verificada na Tabela 2.

Tabela 2. Mecanismos de Westbrook-Dryer para queima de metano

Ar Metano WD1	Ar Metano WD2
$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$	$CH_4 + 1,5O_2 \rightarrow CO + 2H_2O$
	$CO + \frac{1}{2}O_s \rightarrow CO_2$

2.4 Formação de NO

Diferentes mecanismos são responsáveis pela formação de NO em processos de combustão, neste trabalho foram considerados dois mecanismos que são dependentes da temperatura. O processo de formação denominado térmico, que acontece em temperaturas acima de 1800K, ocorre em função da abundante presença de radicais O e N em altas temperaturas, chamado de mecanismo de Zeldovich que tem a forma



Também há grande formação de em regiões do processo de combustão do metano onde a temperatura inferior à 1800K, e não são explicadas pelo mecanismo de Zeldovich. Sua presença é consequência da reação de radicais de hidrocarbonetos com o nitrogênio, formando HCN, o qual oxida formando também o NO (Fenimore, 1971) como demonstrado abaixo. Este mecanismo é denominado na literatura como de Mecanismo de Fenimore ou Prompt. Assim,



as reações de formação de NO térmico e NO instantâneo propostas por Warnatz et al. (2006) e De Soete (1975) podem ser verificadas a seguir

$$S_{NO,t} = 2M_{NO}k_t[O][N_2] \quad (21)$$

$$S_{NO,p} = M_{NO}k_p[O_2]^{1/2}[N_2][CH_4]\left(\frac{w}{\rho}\right)^{3/2} \quad (22)$$

onde w é a massa da mistura, fatores k_t e k_p são as constantes de velocidade de reação da equação de Arrhenius, que no CFX é dada por

$$k = Ae^{-T_a/T} \quad (23)$$

Os valores de k_t e k_p propostos por Warnatz et al. (2006) e De Soete (1975), juntamente com as temperaturas de ativação, seguem na Tabela 3.

Tabela 3. Coeficientes de k_t e k_p e energia de ativação da equação de Arrhenius.

	Constante da velocidade de reação (1/s)	Temperatura de ativação T_a (K)
NO térmico	$1,8 \times 10^{11}$	38370
NO instantâneo	$6,4 \times 10^6$	36510

2.5 Equação da conservação da energia

A equação da conservação de energia para o processo de combustão no forno pode ser representada por

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_i h_{tot}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\lambda \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right] + \bar{S}_{rad} + \bar{S}_{rea} + \bar{S}_t \quad (24)$$

onde h_{tot} é a entalpia total dada por $h_{tot} = h + 1/2 \tilde{u}_i^2 + k$, sendo $k = 1/2 \bar{u}_i^2$, Pr_t é o número de Prandtl para escoamento turbulento, λ é a condutividade térmica, $\bar{S}_t$ é o termo fonte volumétrico que pode representar eventuais fontes ou sumidouros (como dissipações viscosas), $\bar{S}_{rea}$ é o calor proveniente das reações de formação e destruição de espécies químicas dada por

$$\bar{S}_{rea} = \sum_{\alpha} \left(\frac{h_{\alpha}^0}{\overline{MM}_{\alpha}} + \int_{\tilde{T}_{ref,\alpha}}^{\tilde{T}} c_{p,\alpha} d\tilde{T} \right) \times \bar{R}_{\alpha} \quad (25)$$

onde α é uma espécie química, h_{α}^0 é a entalpia de formação específica, $\overline{MM}_{\alpha}$ é a massa da mistura molecular da componente α , $\tilde{T}_{ref,\alpha}$ é a temperatura média de referência de cada espécie

química e $\bar{R}_\alpha$ é a taxa de formação/destruição das espécies químicas visto anteriormente. Na câmara de combustão do forno a radiação é o principal contribuinte da transferência de calor para a carga de petróleo. Neste trabalho serão desconsideradas as dissipações viscosas, portanto S_{rad} pode ser definido como o termo fonte devido à radiação.

2.6 Modelo para Radiação

O objetivo da modelagem da radiação é obter o termo fonte $\bar{S}_{rad}$ da equação da conservação da energia e o fluxo de radiação das paredes entre outras quantidades (Ansys, 2015). O CFX permite a utilização de modelos específicos para o tratamento dos fenômenos ligados à radiação térmica. Segundo Lockwood e Shah (1981) a Equação da transferência de Radiante (ETR) para um meio em equilíbrio dinâmico local pode ser escrita como

$$\frac{dI_\nu(\vec{r}, \vec{s})}{ds} = \left[- (K_{av} + K_{sv}) I_\nu(\vec{r}, \vec{s}) + K_{av} I_b(\nu, T) + \frac{K_{sv}}{4\pi} \int I_\nu(\vec{r}, \vec{s}') d\Omega' + S \right] \quad (26)$$

onde I_ν é a intensidade da radiação espectral dependente da posição (r) e direção (s), I_b intensidade da radiação de corpo negro, ν é a frequência, K_a coeficiente de absorção, K_s coeficiente de espalhamento, T é temperatura local, Ω é ângulo sólido, Φ função de fase de espalhamento, S termo de intensidade de radiação.

Neste trabalho a opção utilizada na modelagem da radiação foi de um modelo de transferência discreto, o *DTRM (Discrete Transfer Radiation Model)* (Lockwood e Shah, 1981) acoplado ao modelo espectral de Gás Cinza que assume que a intensidade de radiação é a mesma para todo o espectro de frequências. Isto implica que apenas uma equação de transferência radiativa deve ser resolvida para todo o problema da radiação (Ansys 2015).

No modelo DTRM o meio participante pode tanto atenuar quanto intensificar o fluxo de calor por radiação e, segundo Siegel e Howel (2002), a intensidade da radiação pode ser descrita como a diferença entre a emissão e a atenuação do meio. Isto pode ser visto pela equação diferencial abaixo

$$\frac{dI_\nu(\vec{r}, \vec{s})}{ds} + k_a I_\nu = \frac{k_a \sigma T^4}{\pi} \quad (27)$$

onde σ é a constante de Stefan-Boltzmann dada por $5,67 \times 10^{-8} [\text{W}/(\text{m}^2 \text{K}^4)]$, I_ν é a intensidade de radiação ao longo do percurso (s), T é a temperatura local do gás e K_a é o coeficiente de absorção gasosa. Assume-se que toda a radiação que deixa a superfície de um elemento em uma gama de raios sólidos que pode ser aproximada pelo comportamento de um único raio (Ansys, 2015). O modelo faz as integrações em diversas direções, para ângulos sólidos diversos, de maneira a cobrir todo o domínio computacional. No CFX o DTRM é implementado no modelo volumes finitos assumindo que o espalhamento no interior da câmara é isotrópico e o sistema é homogêneo.

2.7 Condições de contorno

As condições de contorno utilizadas para o equipamento foram baseadas na operação do equipamento real, com modificação na composição do combustível. Foi utilizado combustível composto por 100% de metano e o oxidante composto por ar seco pré-aquecido, com um excesso de ar de 15% conforme API STD 560. A modelagem proposta utiliza o modelo de gás ideal e forno adiabático com exaustão dos gases de combustão por meio de exaustor.

As condições de contorno utilizadas na simulação foram adaptadas à operação de $\frac{1}{4}$ do forno, os dados de pressão e vazões de ar e combustível são os mesmos usados em operação normal. A Tabela 4 apresenta todas as condições de contorno adotadas neste estudo.

Tabela 4. Condições de contorno utilizadas.

Combustível	100% CH ₄
Vazão de combustível	0,3 kg/s
Temperatura do combustível	300,15 K
Vazão de ar (seco)	4,8 kg/s
Temperatura do ar pré-aquecido	543,15 K
Pressão da saída da chaminé	-100 Pa
Pressão atmosférica	101325 Pa
Emissividade da superfície dos tubos	0,85
Emissividade da parede interna	0,6
Vazão de petróleo	0,11574m ³ /s
Temperatura inicial do petróleo	563,15K

2.8 Determinação da carga térmica para os tubos

A transferência de calor nos tubos do forno depende de uma série fatores como a temperatura a qual o petróleo na entrada, vazão de petróleo, vazão de combustível queimado, composições do petróleo e do combustível, excesso de ar na queima, pressão na câmara de combustão, geometria do equipamento, isolamento térmico, material e diâmetro dos tubos utilizados. Se for levado em conta ainda, que o petróleo no interior do forno sofre vaporização parcial e o escoamento em algumas regiões da serpentina de petróleo deve ser considerado como bifásico, a complexidade do problema tornaria o custo computacional proibitivo.

Neste trabalho não foi modelado o fluxo interno de petróleo nos tubos da serpentina de aquecimento. Baseando-se no trabalho de Diaz e Castro (2011), foi proposto substituir a modelagem no interior dos tubos por condições de contorno calculadas pelo software comercial HTRI Xfh. O software utiliza o método das zonas em conjunto com a norma API 530 para cálculo do fluxo de calor para a serpentina de petróleo e demais condições operacionais do forno tendo como entradas os dados já vistos na Tabela 4. Desta forma na simulação em CFD, foi utilizado o fluxo de calor calculado como condição de contorno para a modelagem dos tubos do forno.

Caracterização do petróleo

A caracterização do petróleo implica diretamente na carga térmica do forno, este fluido de trabalho é formado por uma mistura de hidrocarbonetos, chamados de pseudo-componentes. Neste trabalho estes pseudo-componentes foram calculados pelo software a partir de uma curva dos verdadeiros pontos de ebulição, ou curva API (American Petroleum Institute) TBP (*True Boiling Point curve*). A partir dela é possível prever o rendimento em termos de produtos daquele petróleo analisado (Falla, 2006). A curva API TBP varia seu formato de acordo com a composição química da amostra a ser analisada (Behrenbruch e Dedigama, 2007).

Para a simulação foi utilizado dados do petróleo Nigeriano denominado Bonga, de Grau API 29,4 que foi escolhido por ser um valor médio semelhante ao utilizado na análise do forno modelo. Os dados deste petróleo estão disponíveis ao público na página da TOTSA (<https://www.totsa.com/pub/crude/equity.php?doc+/dci/reports/cruderpt.nsf/abeada226fd72769c1256a5400559543/e20d06fa11b918adc1257eec005e9d37?opendocument>). A Figura 4 mostra a curva TBP para este petróleo.

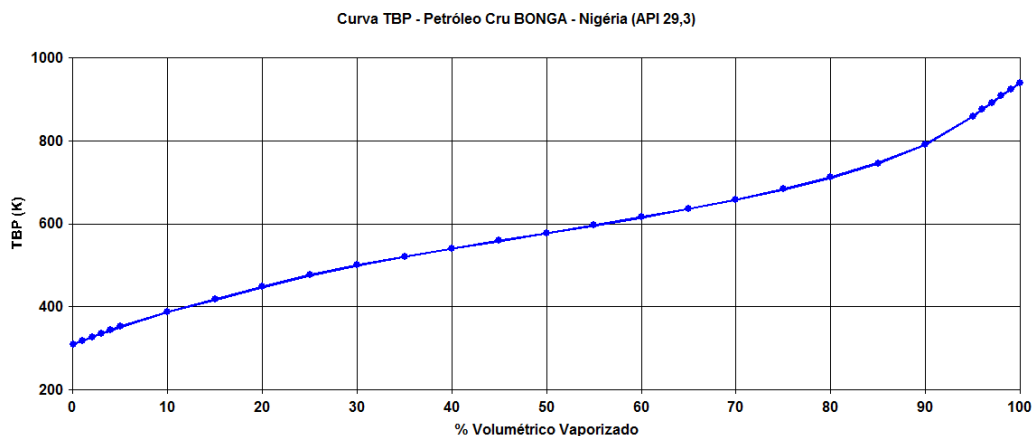


Figura 4: Curva TBP estimada para Petróleo Nigeriano "Bonga"

A partir dos dados da curva TBP o Software HTRI Xfh calcula para os pseudo-componentes que formam o petróleo, fatores como densidade, pressões parciais, entalpias, viscosidade, capacidades caloríficas e outras características termodinâmicas do fluido. O pacote de equações empíricas em conjunto com o seu extenso banco de dados possibilita ao HTRI uma boa aproximação da troca térmica no interior dos tubos do forno levando em conta as

propriedades dos múltiplos componentes da mistura de hidrocarbonetos. A simulação do processo de combustão em permitiu a obtenção do fluxo de calor médio aos tubos do forno em W/m^2 . Alguns autores como Souza et al. (2006), Bayat et al. (2012), Cui et al. (2012) e Fontoura et al. (2013) realizaram simulações em CFD de escoamento bifásico de petróleo cru limitando o número pseudo-componentes conforme a sua análise. A implementação destes processos em CFD aumentaria consideravelmente o tamanho da malha, Li et al. (2015) realizaram trabalho sobre o escoamento de petróleo em tubulações de fornos utilizando para isso malhas com mais de 2×10^6 células por tubulação de dimensões semelhantes às utilizados neste trabalho. A adição de um modelo de escoamento nos tubos além de não ser necessário à simulação aumentaria consideravelmente esforço computacional, talvez vindo a inviabilizar o modelo.

Para o petróleo usado como base e com as condições operacionais da Tabela 4 o software HTRI Xfh obteve como resposta um fluxo de calor médio de $57,1 \text{ kW}$ para cada m^2 de superfície dos tubos. A distribuição da carga térmica média dos tubos na região dos tubos ao topo pode ser verificada na Figura 5. Estes dados foram usados no CFX como condição de contorno para a troca de calor dos tubos na simulação.

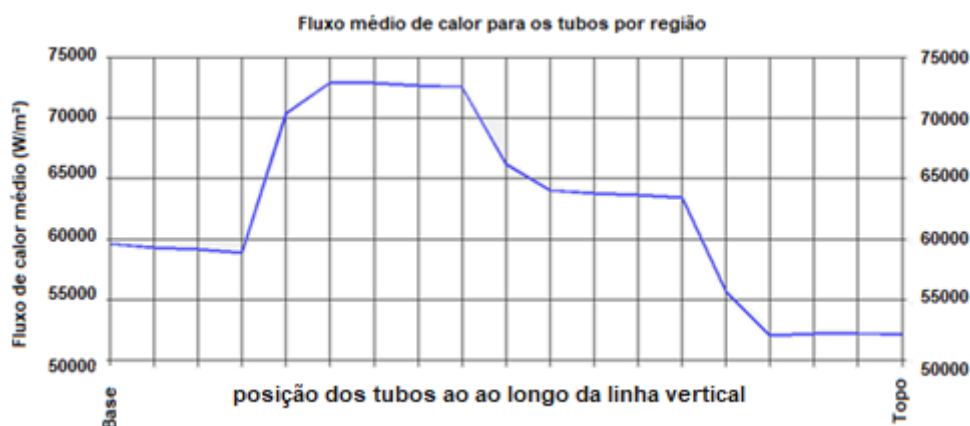


Figura 5: Fluxo de calor médio para os tubos de acordo com a região na linha vertical

3. RESULTADOS OBTIDOS

A simulação em CFD apresenta uma série de resultados sobre o escoamento reativo do fluido no interior do forno, destes os que serão comparados os resultados das simulações do processo de combustão utilizando os modelos WD1 e WD2. Foram comparados, para regiões específicas do forno, as velocidades de escoamento, perfis de temperatura na região da chama e sob os tubos e concentração de NO.

3.1 Velocidade de escoamento

A Figura 6 mostra os campos de velocidade no interior do forno, estes campos são observados sob planos horizontais. A Figura 6(a) mostra campos formados pelos vetores de

velocidade para o modelo de combustão WD2 e a Figura 6(b) mostra campos de velocidade para o modelo WD1.

Os planos analisados nas figuras 6(a) e 6(b) estão nas mesmas alturas 0,8m, 4,5m e 8m. Os campos mais próximos aos queimadores apresentaram, como esperado, velocidades superiores aos campos mais distantes destas entradas. Os campos na Figura 6(b) (modelo WD1) apresentaram velocidade superior às vistas na Figura 6(a) (modelo WD2) embora estejam dentro da mesma ordem de grandeza.

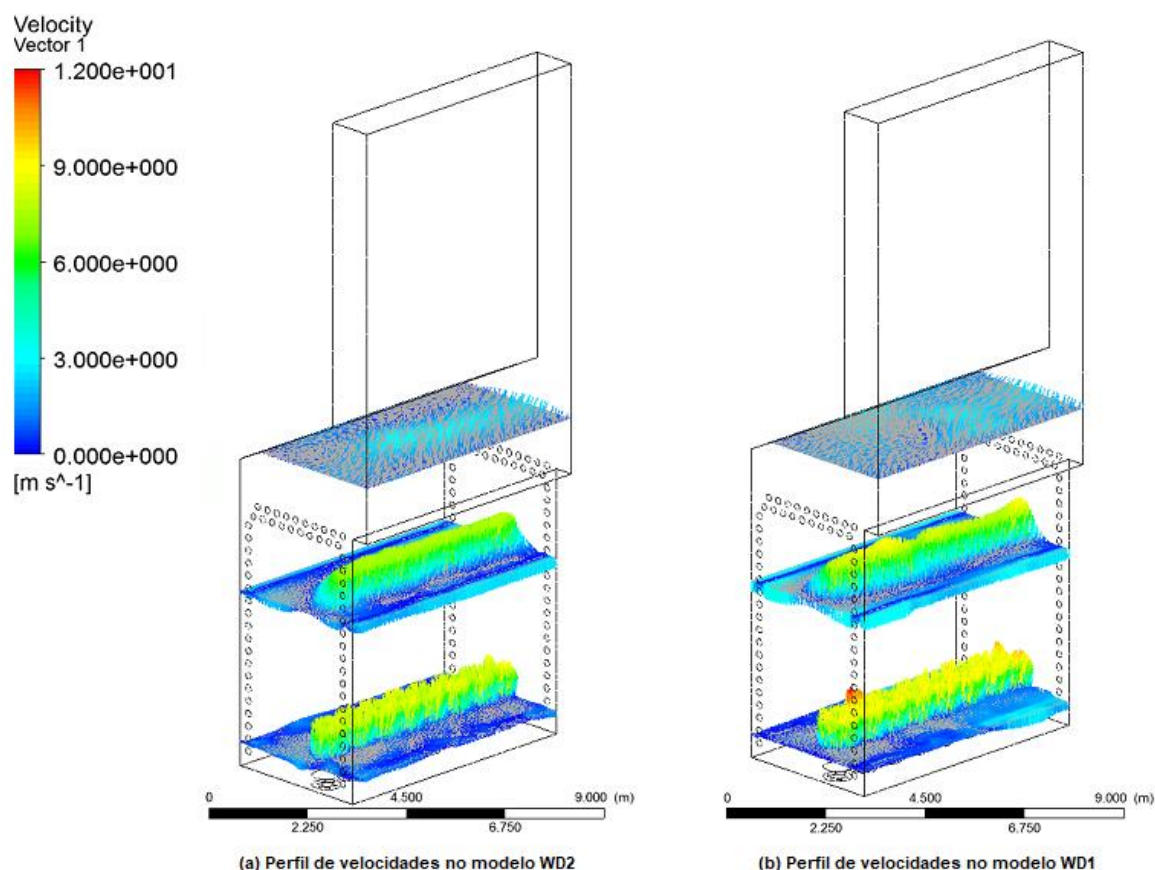


Figura 6: Campo de velocidades

As diferenças percebidas entre campos de velocidade entre as figuras 6(a) e 6(b) pode ser justificada pelo número de iterações necessárias aos cálculos do modelo WD2. Enquanto o modelo WD1 tende a ser chegar mais rapidamente para um fator de convergência de 10^{-4} , o modelo WD2 precisa de mais cálculos, consequentemente algumas equações como as de conservação de quantidade de movimento chegam a resultados mais precisos.

3.2 Perfis de temperatura

O perfil de temperatura do forno apresenta diferenças entre os modelos WD1 e WD2 como pode ser visto na Figura 7. Os dois modelos apresentaram temperaturas da mesma ordem de grandeza ao analisar o plano central dos queimadores, mas o modelo WD2 visto na Figura

7(a) apresenta um perfil mais aproximado ao perfil de chama. Esta diferença entre oWD2 e WD1 vistos na Figura 7(a) e 7(b) respectivamente mostra o efeito das reações intermediárias do processo de combustão. Foi verificado que para este perfil a máxima temperatura atingida para o modeloWD2 foi de 2047K enquanto que para o modelo WD1 foi de 2098K, 2,49% a mais.

A temperatura dos tubos não veio a apresentar diferença significativa comparando os modelos WD1 e WD2. O Perfil da temperatura pode ser verificado na Figura 8(a) para o modelo WD2 e na Figura 8(b) para o WD1.

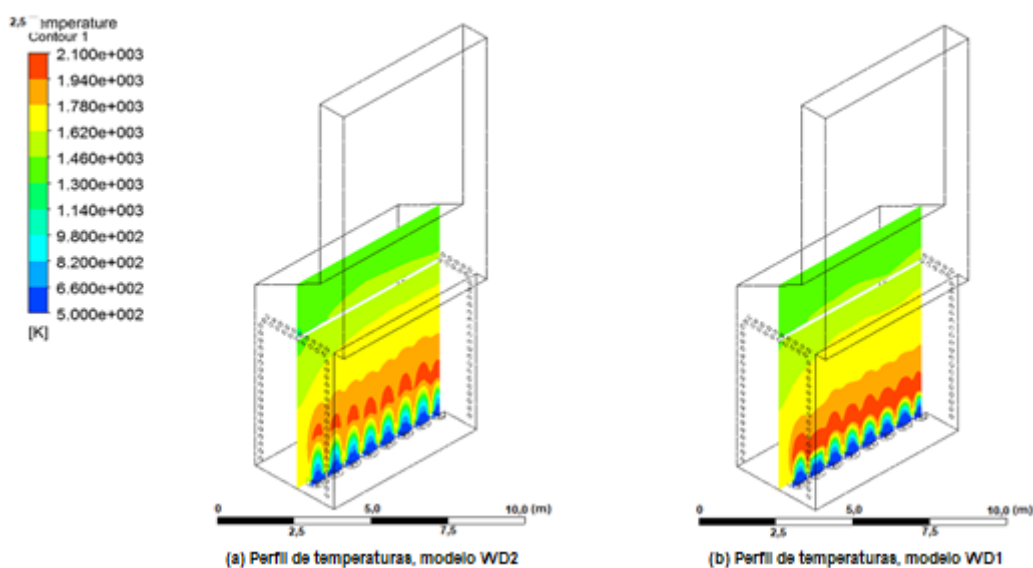


Figura 7: Perfil de temperatura na zona de combustão

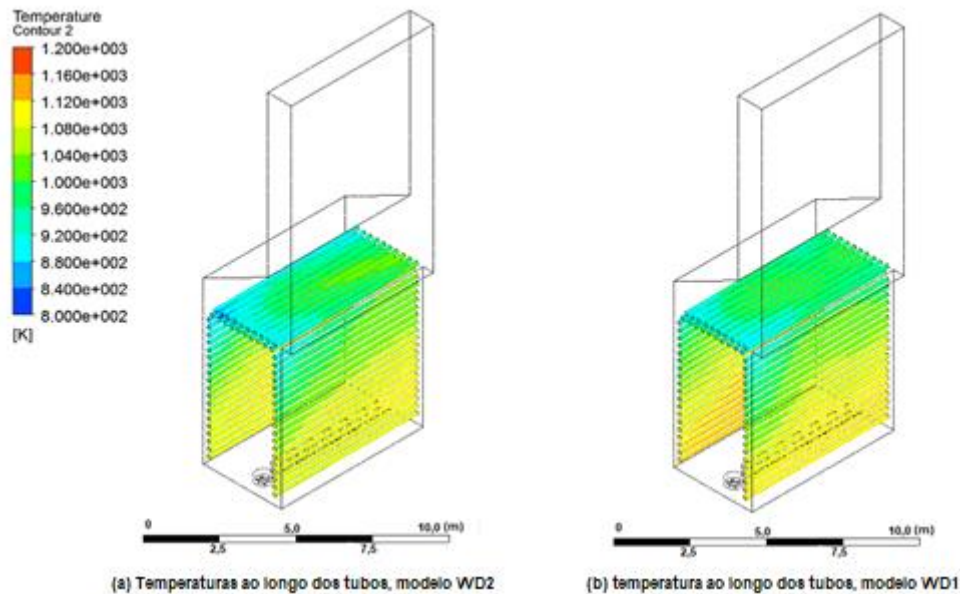


Figura 8: Perfil de temperatura dos tubos

Aparentemente as temperaturas dos tubos das duas simulações apresentam valores elevados (acima de 1000K) em alguns pontos. Isto pode indicar que a condição operacional não seja a ideal para o tipo de petróleo utilizado na simulação. Petróleos com grau API mais baixo tendem a sofrer menor vaporização do que os de grau API mais elevado.

3.3 Formação de NO

Sob o mesmo plano da análise anterior pode-se verificar a formação de NO na combustão dos modelos WD2 (Figura 9(a)) e WD1 (Figura 9(b)). Os dois modelos apresentam baixa produção de NO, apesar disto o modelo WD2 demonstrou uma produção 2,52 vezes menor comparado ao WD1. Os perfis mostram que em ambas as simulações a concentração de NO se mostra mais intensa nas regiões acima da reação de combustão, estas regiões apresentam temperatura elevada e ainda possuem concentrações de Oxigênio.

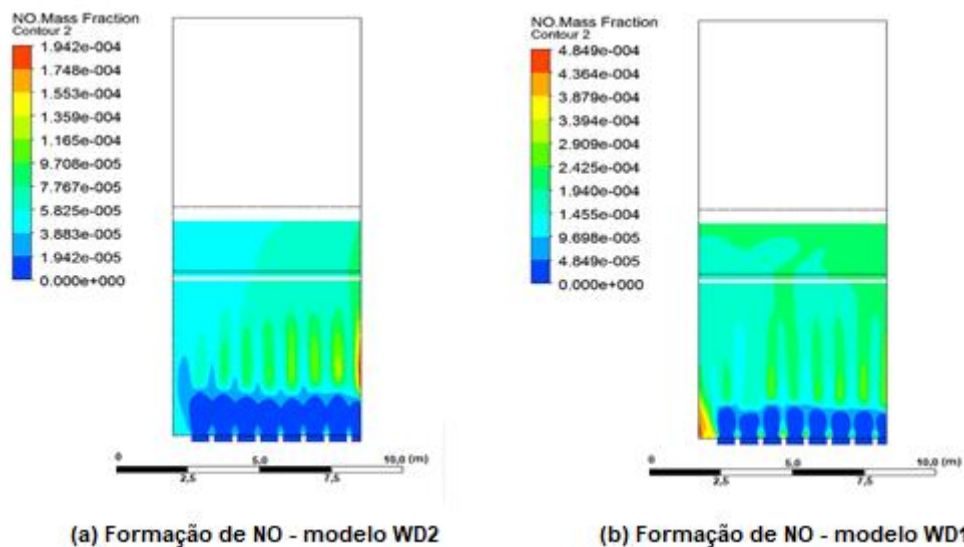


Figura 9: Perfil de formação de NO

3.4 Formação de CO

Concentrações de CO proveniente da câmara de combustão do forno são resultado de queima incompleta relacionada com baixa disponibilidade de oxidante ou uma mistura rica em combustível. O modelo WD2 contempla a formação da espécie intermediária CO enquanto que o modelo WD1 não possibilita esta verificação, limitando-se a haver ou não a reação. Cenários de queima incompleta do combustível são possíveis na operação dos fornos, podendo haver tanto a liberação de combustível quanto de CO para a atmosfera por isso uma simulação mais completa precisa verificar a presença destas espécies nos gases de combustão. A Figura 9 mostra a formação de CO na câmara de combustão quando aplicado o modelo WD2. Como o esperado a formação de CO se inicia logo após a mistura dos gás combustível com o ar, aumentando sua concentração à medida que atinge campos de temperatura mais elevadas até todo o CO ser consumido.

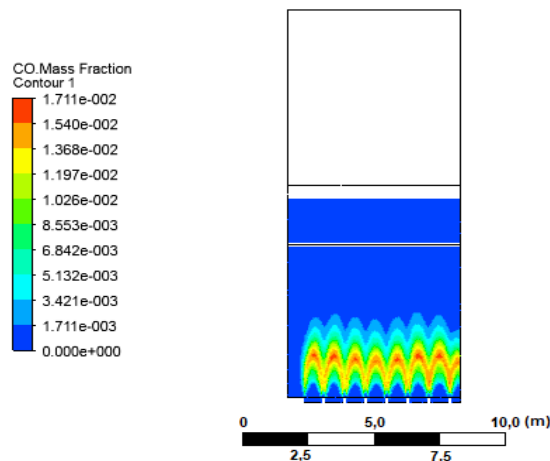


Figura 10: Formação de CO verificada pelo modelo WD2

4. Conclusões

Neste trabalho foi proposto a utilização do software Ansys CFX para a simulação de fornos de unidades de destilação utilizando dados de operação e de projeto de um forno que está em operação atualmente na região de Canoas-Brasil. Foram implementadas simplificações na geometria do equipamento para se poder manter uma quantidade razoável de volumes de controle sobre a região da câmara de combustão. A modelagem no Ansys CFX previu a solução das equações de transporte a fim de resolver os problemas de escoamento, combustão e radiação. O processo de combustão foi implementado em duas modelagens globais, uma com o modelo WD1, e outra com o modelo WD2, a fim de poder identificar divergências em simulações de equipamentos de grande porte. A radiação foi simulada de acordo com o modelo DTRM acoplado ao modelo de Gases Cinza, a fim de prever o comportamento da absorção e emissão dos gases quentes da combustão. Como medida para representar o campo de temperaturas sobre a superfície dos tubos no interior do forno, optou-se por utilizar o software HTRI Xfh para poder obter as condições de contorno necessárias à modelagem do fluxo de calor para os tubos de petróleo. Esta modelagem com software HTRI Xfh utilizou dados de domínio público da curva TBP de um petróleo de Grau API médio obtido da página da petrolífera TOTSA. Como resultados, foi identificado que o modelo de combustão afeta os campos de velocidades pela alteração dos campos de concentração e temperaturas, apresentando chamas de magnitudes diferentes. O modelo WD1 apresentou valores superiores para as temperaturas no interior da câmara de combustão e consequente maior formação de NO. Tanto a simulação com o modelo WD1 quanto a WD2 diferiram pouco no que diz respeito à temperatura dos tubos de equipamento. No geral a simulação como modelo WD2 leva vantagem sobre a WD1 pela previsão da formação de CO na câmara de combustão.

REFERÊNCIAS

- ANSYS CFX 15.0 User Manual, 2015. Canonsburg, PA, USA, ANSYS Inc.,.
- API Technical Data Book - Petroleum Refining. (2008). Am. Pet. Inst., Ed. 6.
- Arrieta, A., Cadavid, F. e Amell, A., 2011. *Simulación numérica de hornos de combustión equipados con quemadores radiantes*, Ingeniería y Universidad Bogotá, vol. 15, pp. 9 - 28.
- Bayat M., Aminian J., Bazmi M., Shahhosseini S. e Sharifi K., 2012. *CFD modeling of fouling in crude oil pre-heaters*, Energy Convers. Manage., vol. 64, pp. 344-350.
- Behrenbruch P. e Dedigama T., 2007. *Classification and Characterisation of crude oils based on distillation properties*, J. Pet Sci. & Eng., vol. 57, pp. 166-180
- Cui X., Li X. e Sui H. 2012. *Computacional fluid dynamics simulations of direct contact heat and mass transfer of a multicomponent two-phase film flow in an inclined channel at sub-atmospheric pressure*, International Journal of Heat and Mass Transfer, vol. 55, pp. 5808-5818.
- De Soete, G., 1974. *Overall reaction rates of NO and N₂ formation from fuel nitrogen*. 15th Symposium International on Combustion, Pittsburgh, pp. 1093-1102.
- Diaz, F. A. e Castro, J. A. 2010. *Mathematical model for refinery furnaces simulation*. CT&F - Ciencia, Tecnología y Futuro, vol. 4, pp. 89 - 99.
- Falla F.S., Larini C., Le Roux G.A.C., Quina F.H., Moro L.F.L. e Nascimento C.A.O. ,2006. *Characterization of crude petroleum by NIR*. J. Pet Sci. & Eng., vol. 51, pp. 127-137.
- FENIMORE, C. P., 1971. *Formation of nitric oxide in premixed hydrocarbon flames*. Symposium (International) on Combustion, v. 13, pp. 373–380.
- Fontoura D.V.R., Matos E.M. e Nunhez J.R., 2013. *Three-dimensional two-phase flow model with phase change inside a tube of petrochemical pre-heaters*, Fuel, vol. 110, pp. 196-203.
- Habibi, A., Merci, B. e Heynderickx, G. J., 2007. *Impact of radiation models in CFD simulations of steam cracking furnaces*. Comp. and Chem. Eng. , vol.31, pp. 1389 - 1406.
- Heynderickx, G. J., Oprins, A. J. M., Marin, G. B., Dick, E., 2001. *Three-Dimensional Flow Patterns in Cracking Furnaces with Long-Flame Burners*. AIChE Journal, vol. 47 , pp. 388 - 400.
- Hottel, H. C., 1974. *First estimates of industrial furnace performance, the one-gas-zone model re-examined*. Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Mass., EUA.
- Hu, G., Wang, H., Qian, F., Zhang, Y., Li, J., Van Geem, K.M., Marin, G.B., 2011. *Comprehensive CFD simulation of product yields and coking rates for a floor-and-wall-fired naphtha cracking furnace*. Ind. and Eng. Chem. Vol. 50, pp. 13672–13685.
- Guihua, H., Honggang, W. e Feng, Q., 2011. *Numerical simulation on flow, combustion and heat transfer of ethylene cracking furnaces*. Chem. Eng. Sci., vol8, pp. 1600-1611
- Launder, B. E. e Sandham, N. D., 2001. *Closure Strategies for Turbulent and Transitional Flows*. 1st ed. Cambridge University Press.
- Launder, B. E. e Spalding, D. B. (1974). *The numerical computation of turbulent flows*. Com. Meth. in Applied Mech. and Eng., vol. 3, pp. 269-289.

- Li X., Zhang L., Sun Y. Jiang B., Li X. e Wang J., 2015. *Numerical simulations of the flue gasside for refininig vacuum furnace using CFD*, Chem. Eng. Sci., vol. 123, pp. 70-80.
- Lobo, W. E. e Evans, J. E., 1939. *Heat Transfer in Radiant Section of Petroleum Heaters*, Trans. of Am. Inst. of Chem. Eng., vol. 35, pp. 748-778.
- Lobo, W. E., 1974. *Design of Furnaces With Flue Gass Temperature Gradients*, Chem. Eng. Progress, vol. 01, pp. 66-71.
- Lockwood, F. C. e Shah, N. G., 1981. *A new radiation solution method for incorporation in general combustion prediction procedures*, Eighteenth Symposium International on Combustionm The Combustion Institute, pp.1405-1414.
- Magnussem, B. F. e Hjertager, B.H., 1977. *On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion*, XVI Symposium international on Combustion – The Combustion Institute, pp. 719-729.
- Oprins, A. J. M. e Heynderickx, G. J., 2003. *Calculation of three-dimensional flow and pressure fields in cracking furnaces*. Chemical Engineering Science., vol. 58 , pp. 4883 - 4893.
- Patankar, S., 1980. *Numerical heat transfer and fluid flow*. Hemisphere, New York.
- Siegel, R. e Howell, J. R., 2002. *Thermal Radiation Heat Transfer*, 4th edn, Taylor & Francis, New York – London.
- Souza, B., Matos, E., Guirardello, R. e Nunhez, J., 2006. *Predicting coke formation due to thermal cracking inside tubes of petrochemical fired heaters using a fast CFD formulation*. J. of Pet. Sci. and Eng., vol. 51, pp. 138–148.
- Stefanidis, G. D., Merci, B., Heynderickx, G. J. e Marin, G. B., 2006. *CFD simulations of steam cracking furnaces using detailed combustion mechanisms*. Com. and Chem. Eng., vol. 30, pp. 635 - 649.
- Veynante, D. e Verisch, L., 20002. *Turbulent combustion modeling*. Progress in Energy and Combustion Science, vol. 28, pp. 193-266.
- Warnatz, J.; Mass, U. e Dibble, R. W, 2006. *Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation*. 4 th. : Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- Westbrook, C. e Dryer, F., 1981. *Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames*. Com. Sci. and Tech., vol. 27, núms. 1-2, pp. 31-43.
- Yang, J., Tai, N., Wang, L., Xiao, J. e Yang, C., 2012. *Numerical simulation of the flue gas and process side of coking furnaces*. Ind. and Eng. Chem. Research, vol. 51, pp. 15440–15447.
- Caracterização do petróleo Nigeriano Bonga
<<https://www.totsa.com/pub/crude/equity.php?doc+/dci/reports/cruderpt.nsf/abeada226fd72769c1256a5400559543/e20d06fa11b918adc1257eec005e9d37?opendocument>>. Acessado em 06 de Nov. De 2017.