

**UNIVERSIDADE DO VALE DO RIO DOS SINOS
UNIDADE ACADÊMICA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA
NÍVEL MESTRADO**

PETERSON MACHADO DE OLIVEIRA

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

**SÃO LEOPOLDO
2018**

Peterson Machado de Oliveira

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

Dissertação apresentada como requisito parcial
para a obtenção do título de Mestre em
Engenharia Mecânica, pelo Programa de Pós-
Graduação em Engenharia Mecânica da
UNISINOS

Orientadora: Profa. Dra. Flávia Schwarz Franceschini Zinani

Coorientador: Prof. Dr. Cristiano Vitorino da Silva

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Luiz Alberto Oliveira Rocha
Prof. Dr. Paulo Roberto Wander

SÃO LEOPOLDO
2018

O48a Oliveira, Peterson Machado de.
Análise em CFD de uma câmara de combustão de um forno de destilação atmosférica de petróleo / Peterson Machado de Oliveira. – 2018.
104 f. : il. color. ; 30 cm.

Dissertação (mestrado) – Universidade do Vale do Rio dos Sinos, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, São Leopoldo, 2018.
“Orientadora: Profa. Dra. Flávia Schwarz Franceschini Zinani ; Coorientador: Prof. Dr. Cristiano Vitorino da Silva.”

1. Combustão. 2. Fornos - Combustão. 3. Tubos . 4. Indústria petroquímica. I. Título.

CDU 621

RESUMO

Durante a etapa de projeto de fornos de unidades de destilação atmosférica 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, acabam por passar por modificações no projeto original e, portanto, faz-se necessário também que hajam ferramentas capazes de se adaptar e identificar os efeitos destas mudanças. No intuito de avaliar as condições de operação de um forno 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, turbulento e não isotérmico é implementada para simular o processo de combustão e a transferência de calor no interior do forno. A modelagem teve como base a solução das equações de conservação de massa, de quantidade de movimento, de energia e de espécies químicas, considerando a radiação térmica em meios participantes, além da modelagem por taxas finitas de reações químicas com o modelo Eddy Breakup - Arrhenius para representar a queima do combustível em dois passos. A turbulência foi representada no escoamento através do modelo $k-\epsilon$ e o espectro de absorção dos gases de combustão na radiação térmica foi descrito pelo modelo WSGG - Weighted Sum of Gray Gases. A solução das equações de conservação em acoplamento aos demais modelos selecionados é desenvolvida pelo Método de Volumes Finitos. Para avaliar o fluxo médio de calor para o petróleo foi utilizado o software comercial HTRI Xfh 6.0 e seus resultados foram aplicados como condições de contorno no modelo numérico no CFX. A validação da modelagem é realizada por comparação com dados experimentais e numéricos disponíveis na literatura e por comparação com dados experimentais operacionais do forno. Como principais resultados apresentam-se os campos de temperaturas no interior do forno e a influência da geometria destes equipamentos no fluxo dos gases de combustão. Além disto, foi possível verificar o perfil de temperatura ao longo de cada tubo da serpentina de aquecimento individualmente bem como a distribuição de concentração de espécies químicas e taxas de transferência de calor na câmara de combustão. A modelagem numérica apresentou resultados mais próximos aos dados operacionais quando comparada a simulação com o software HTRI Xfh, mas em ambas as simulações as temperaturas obtidas estavam dentro da mesma ordem de grandeza, apresentando diferença máxima de 12,5% entre si.

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

LISTA DE SIGLAS

| | |
|------|--|
| API | <i>American Petroleum Institute</i> |
| CFD | <i>Computacional Fluid Dynamics</i> |
| CGI | <i>Convergence Grid Index</i> |
| DTRM | <i>Discrete Transfer Radiation Model</i> |
| EDM | <i>Eddy Dissipation Model</i> |
| ETR | Equação de Transferência Radiante |
| FRC | <i>Finite Rate Chemistry</i> |
| MVF | Método dos Volumes Finitos |
| RANS | <i>Reynolds-averaged Navier–Stokes</i> |
| STD | <i>Standard</i> |
| TBP | <i>True Boiling Point</i> |
| VF | Volume Finito |
| WD | <i>Westbrook e Dryer</i> |

LISTA DE SIMBOLOS

| | |
|--------------------|---|
| $[I]$ | Concentração da <i>I-ésima</i> [-] |
| A_k | Coefficiente pré-exponencial [-] |
| B_k | Constante da taxa de reação de retorno [-] |
| C_μ | Constante da equação de μ_t [-] |
| $C_{1\varepsilon}$ | Constante da equação de ε [-] |
| $C_{2\varepsilon}$ | Constante da equação de ε [-] |
| e | Erro relativo entre soluções para as malhas selecionadas [%] |
| e_{ext} | Erro relativo entre a solução extrapolada e a malha selecionada [%] |
| E_A | Energia de ativação [J/kmol] |
| f_I | Solução de uma variável para a malha menos refinada |
| F_k | Constante da taxa de reação de avanço [-] |
| GCI | Índice do método GCI [-] |
| h | Entalpia[kJ/kg] |
| h | Tamanho representativo de malha [mm] |
| i | Ordem da função polinomial do modelo WSGG [-] |
| I | <i>I-ésima</i> espécie química nas reações |
| I_b | Intensidade de radiação de corpo negro [W/m ²] |
| I_ν | Intensidade de radiação espectral [W/m ²] |
| j | Índice relativo ao gás cinza considerado no modelo WSGG |
| k | Energia cinética turbulenta [m ² /s ²] |
| k_p | Constante da velocidade de reação da equação de Arrhenius [1/s] |
| k_t | Constante da velocidade de reação da equação de Arrhenius [1/s] |
| K_a | Coefficiente de absorção [-] |
| K_s | Coefficiente de espalhamento [-] |
| MM | Massa molecular [kg/kmol] |
| p | Ordem aparente da solução do modelo GCI [-] |
| P | Pressão [Pa] |
| P | Número do passe do forno [-] |
| Pr_t | Número de Prandtl para escoamento turbulento [-] |
| r | Ordem do componente <i>I-ésima espécie química</i> [-] |
| R | Constante universal dos gases [J/(mol.K)] |

| | |
|------|---|
| Rk | Taxa da reação elementar k [-] |
| S | Distância ou posição espacial [m] |
| S | Termo fonte das equações de transporte [-] |
| t | Número do tube no passe do forno [-] |
| T | Termo fonte das equações de transporte [-] |
| Ta | Temperatura [K] |
| To | Temperatura interna [K] |
| Tw | Temperatura de superfície [K] |
| v | Velocidade escalar na direção radial [m/s] |
| u | Velocidade escalar na direção axial [m/s] |
| w | Velocidade escalar no sentido angular [m/s] |
| W | Massa de mistura [kg] |

LISTA DE SÍMBOLOS GREGOS

| | |
|----------------------|--|
| β | Expoente de temperatura [-] |
| δ_{ij} | Delta de Kronecker [-] |
| ε | Dissipação da energia cinética turbulenta[m ² /s ³] |
| η' | Coefficiente estequiométrico de um composto na reação de avanço [-] |
| η'' | Coefficiente estequiométrico de um composto na reação de retorno [-] |
| λ | Condutividade térmica[W/(m.K)] |
| μ | Viscosidade absoluta [Ns/m ²] |
| μ_t | Viscosidade turbulenta [Ns/m ²] |
| ρ | Massa específica da mistura [kg/m ³] |
| σ | Constante de Stefan-Boltzman [5,67×10 ⁻⁸ W/(m ² .K ⁴)] |
| σ_k | Número de Prandtl turbulento da equação de conservação de κ [-] |
| σ_ε | Número de Prandtl turbulento da equação de conservação de ε [-] |
| Φ | Função de fase de espalhamento [-] |
| ϕ | Variável utilizada para cálculo das médias de Reynolds e médias de Favre |
| k_j | Coefficiente de absorção do gás j do modelo WSGG [-] |
| χ | Variável de verificação de convergência assintótica no método GCI [-] |
| Ω | Ângulo sólido [rad] |

SUMÁRIO

| | |
|--|----|
| 1 INTRODUÇÃO | 10 |
| 1.1 OBJETIVOS DO TRABALHO | 11 |
| 1.1.1 Objetivo Geral | 11 |
| 1.1.2 Objetivos Específicos | 12 |
| 1.1.3 Justificativa..... | 12 |
| 1.2 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO | 12 |
| 2 REVISÃO DA LITERATURA | 14 |
| 2.1 FORNOS DE UNIDADES DE DESTILAÇÃO ATMOSFÉRICA..... | 14 |
| 2.2 SIMULAÇÕES DE PROCESSOS DE COMBUSTÃO PARA FORNOS NA INDÚSTRIA PETROQUÍMICA | 17 |
| 2.3 SIMULAÇÕES DE ESCOAMENTO EM TUBOS DE EQUIPAMENTOS DA INDÚSTRIA PETROQUÍMICA | 22 |
| 2.4 MODELOS EM CFD UTILIZADOS PARA A SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE ESCOAMENTO REATIVO | 25 |
| 3 MATERIAIS E MÉTODOS..... | 27 |
| 3.1 MODELAGEM DO ESCOAMENTO TURBULENTO E REATIVO | 28 |
| 3.2 MODELAGEM DA COMBUSTÃO | 31 |
| 3.3 FORMAÇÃO DE NO | 34 |
| 3.4 EQUAÇÃO DA CONSERVAÇÃO DA ENERGIA | 35 |
| 3.5 MODELO PARA RADIAÇÃO | 36 |
| 3.5.1 Modelo DTRM..... | 37 |
| 3.5.2 Modelo WSGG..... | 38 |
| 3.6 DESENVOLVIMENTO DO DOMÍNIO COMPUTACIONAL | 39 |
| 3.6.1 Dados do equipamento modelo | 39 |
| 3.6.2 Condições operacionais..... | 42 |
| 3.6.3 Simplificações da geometria utilizada..... | 42 |
| 3.6.4 Domínio computacional | 44 |
| 3.6.5 Malhas desenvolvidas para o domínio computacional..... | 47 |
| 3.6.6 Metodologia GCI para verificação da convergência de malhas..... | 49 |
| 3.7 CONDIÇÕES DE CONTORNO..... | 52 |
| 3.7.1 Determinação das condições de contorno dos tubos do forno utilizando software HTRI Xfh 6.0 52 | |

| | |
|---|----|
| 3.7.2 Caracterização do petróleo | 54 |
| 3.7.3 Condições de contorno calculadas pelo software HTRI Xfh 6.0 | 55 |
| 3.7.4 Condições de contorno aplicadas ao modelo desenvolvido no software Ansys CFX 18.1..... | 58 |
| 4 VALIDAÇÃO DA MODELAGEM..... | 60 |
| 4.1 REPETITIVIDADE DO MODELO..... | 64 |
| 5 AVALIAÇÃO DA QUALIDADE DA MALHA..... | 65 |
| 6 RESULTADOS | 75 |
| 6.1 COMPARAÇÃO ENTRE AS TEMPERATURAS MÉDIAS CALCULADAS PELOS SOFTWARES ANSYS CFX E HTRI XFH..... | 75 |
| 6.2 COMPARAÇÃO ENTRE AS MÁXIMAS TEMPERATURAS DE SUPERFÍCIE DOS TUBOS | 79 |
| 6.3 ANÁLISE GRÁFICA DE RESULTADOS | 82 |
| 6.4 PERFIL DO FLUXO DE CALOR PARA OS TUBOS..... | 85 |
| 6.5 PERFIS DE TEMPERATURA E INTENSIDADE DE RADIAÇÃO VERIFICADOS PELO ANSYS CFX | 86 |
| 6.6 FORMAÇÃO DE ESPÉCIES QUÍMICAS | 90 |
| 6.7 COMPARAÇÃO COM O MODELO REAL | 91 |
| 7 CONCLUSÕES | 95 |
| 7.1 CONSIDERAÇÕES FINAIS | 98 |
| REFERÊNCIAS | 99 |

1 INTRODUÇÃO

A indústria petroquímica é caracterizada pela complexidade dos seus processos e pelos sucessivos desafios impostos ao aumento da eficiência de suas instalações sem comprometer a segurança e a vida útil dos equipamentos. No processamento de petróleo, devido às operações com produtos altamente inflamáveis aquecidos à altas temperaturas e ao alto investimento requerido às plantas de refino para as etapas de projeto e operação, um dos campos promissores de atuação é o de implementação de sistemas de otimização assistidos por simulações computacionais. A utilização destas tecnologias permite hoje verificar a viabilidade de um projeto antes mesmo da sua implementação ou também calcular quais seriam as condições ótimas para um equipamento que já esteja em operação.

Entre as operações necessárias às etapas iniciais de refino de petróleo, um dos equipamentos mais importantes é o forno de aquecimento. Neste equipamento o fluido é aquecido e vaporizado em uma serpentina no interior da câmara de combustão a fim de que possa estar em condições para seguir para uma torre de destilação de petróleo. A serpentina de aquecimento dos fornos é um dos principais componentes destes equipamentos e por estar exposta diretamente à chama na câmara de combustão precisa que os limites de temperatura dos materiais dos quais é composta sejam respeitados a fim de evitar danos que poderiam ser catastróficos. Uma vez respeitadas as condições limites de trabalho estes equipamentos podem operar por anos sem que haja a necessidade de intervenções como manutenções ou paradas desnecessárias.

A fim de que se possa identificar condições operacionais as quais o forno possa oferecer o melhor rendimento energético sem com isso comprometer sua estrutura e segurança, atualmente estão disponíveis no mercado softwares de computador que podem oferecer aos engenheiros as ferramentas de cálculo capazes de simular os processos de combustão nestes equipamentos.

As tecnologias desenvolvidas para análise de combustão de combustíveis fósseis são baseadas largamente em dados empíricos, proveniente do estudo de caldeiras e sobre dados obtidos a partir de testes simplificados. Atualmente um modelo amplamente utilizado em softwares comerciais é o método multi-zonas desenvolvido por Hottel (1974) em conjunto com dados empíricos de padrões de combustão armazenados em bancos de dados. A aplicação destes softwares permite atualmente bons resultados no que diz respeito à análise de combustão em equipamentos cujos formatos já sejam conhecidos pelo software, apresentando como resultados geralmente boa concordância com o fenômeno físico. As limitações para estes softwares estão

na falta de precisão de alguns cálculos para regiões pontuais na câmara e serpentina de aquecimento, modelos construídos com estes softwares também podem apresentar limitações para representar o escoamento, a convecção, a turbulência, as reações químicas e a radiação térmica. Por estas razões deve-se atentar antes da escolha de uma ferramenta computacional, analisando se o modelo a ser construído possuirá todos os resultados que se tem interesse.

Outra forma de modelagem que tem se tornado comum com os avanços da computação, é o da aplicação da mecânica dos fluidos computacional, ou CFD (*Computational Fluid Dynamics*). O estudo em CFD dos fenômenos ligados aos processos de combustão e escoamento no interior de câmaras de combustão de fornos da indústria petroquímica tem sido empregado a algum tempo, seja no estudo dos efeitos do escoamento turbulento no interior destes equipamentos, como também para avaliar efeitos convectivos e radiativos das reações de combustão. A principal desvantagem da utilização destes modelos está no tempo computacional necessário à solução de alguns problemas.

A utilização de ferramentas computacionais pode trazer à indústria petroquímica muitos benefícios no que diz respeito a otimização de fornos e validação de projetos, economizando tempo e recursos.

1.1 OBJETIVOS DO TRABALHO

1.1.1 Objetivo Geral

Este trabalho tem por objetivo geral o desenvolvimento de um modelo numérico para representar o escoamento turbulento, reativo e não isotérmico no interior da câmara de combustão de um forno de uma unidade de uma planta de destilação atmosférica de petróleo avaliando-se a transferência de calor e reações químicas envolvidas na queima de gás combustível (metano) e, assim, poder identificar o perfil de temperatura no interior destes equipamentos, sobretudo na superfície dos tubos, mesmo quando houver necessidade de mudanças nas suas condições operacionais. Como resultado final, espera-se obter uma metodologia para a avaliação numérica de fornos capaz de ser aplicada independentemente do equipamento a ser estudado.

1.1.2 Objetivos Específicos

- Desenvolver uma modelagem numérica do processo de combustão no interior de uma câmara de combustão de um forno industrial de uma planta de destilação de petróleo, utilizando-se como plataforma de simulação o Software Ansys CFX 18.1.
- Comparar os resultados encontrados na simulação numérica com resultados encontrados em simulações executadas com o software comercial HTRI Xfh.
- Comparar os resultados encontrados nos métodos numérico e com o software comercial com os dados disponíveis do histórico da medição de temperatura dos termopares localizados no interior do forno.

1.1.3 Justificativa

A devida operação de fornos de uma planta do setor petroquímico permite o melhor aproveitamento energético tanto do forno como do processo no qual o equipamento está inserido e, ainda, identificar gargalos no que diz respeito a tirar o melhor proveito da sua estrutura, pois este tipo de análise é alvo de vários estudos e de grande interesse econômico. Complementarmente, a simulação das condições operacionais do forno por meio de CFD tem ganhado espaço na indústria por ter um custo relativamente baixo, ao passo que podem ser utilizadas tanto para projetos, otimização e identificação de falhas neste tipo de equipamento.

A simulação de um equipamento como um forno que opera há décadas em uma planta deste tipo permite avaliar as condições do projeto original e como este respondeu às mudanças que possam ter vindo a ser implementadas durante sua vida útil. Assim, é possível antever a necessidade de modificações estruturais em pontos de sobreaquecimento e também modificação nas condições operacionais.

1.2 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO

A dissertação foi estruturada em três partes distintas, a primeira parte, presente no Cap. 2, mostra uma revisão da literatura sobre o tema de fornos de unidade de destilação, com foco nos métodos desenvolvidos para simular os processos de combustão e as trocas de calor no interior de suas câmaras de combustão. Neste capítulo estão presentes alguns recentes trabalhos

que tratam de modelagens em CFD de processos termodinâmicos presentes em equipamentos do setor petroquímico. Neste capítulo também foram feitas menções sobre os métodos de modelagem de processos combustão em CFD com escoamento turbulento e radiação.

O Cap. 3 mostra a metodologia empregada para o desenvolvimento da modelagem em CFD do processo de combustão e transferência de calor no interior da câmara de combustão do forno. Neste capítulo estão descritas as equações de conservação que foram resolvidas pelo software Ansys CFX e as considerações observadas no equipamento real que levaram ao desenvolvimento do domínio computacional necessário para o desenvolvimento das malhas utilizados para as simulações. Também são descritas neste capítulo as condições de contorno necessárias à modelagem do forno, baseadas em dados operacionais do equipamento. O modelo de combustão utilizado é validado através da análise de dados do trabalho de Silva et al. (2013) disposta no Cap. 4.

No Cap. 5 apresentam-se os testes de qualidade de malha, onde através do método GCI foi analisado a convergência das malhas desenvolvidas para a simulação do equipamento. O Cap. 6 apresenta os resultados obtidos ao fim do processo de simulação do forno industrial estudado, os quais foram comparados com os dados do histórico operacional do equipamento e também com os resultados encontrados com uma simulação com o software HTRI Xfh. O Cap. 7, por fim, traz as conclusões do estudo.

2 REVISÃO DA LITERATURA

2.1 FORNOS DE UNIDADES DE DESTILAÇÃO ATMOSFÉRICA

Fornos de unidades de plantas do setor petroquímico, como os encontrados em processos de destilação de petróleo, são equipamentos robustos, que demandam grandes investimentos e trabalham com grandes vazões de produtos inflamáveis vinte e quatro horas por dia durante todo o ano. Uma vez que falhas, manutenções e paradas inesperadas representam prejuízo à planta, cabe à engenharia das empresas aplicar novas tecnologias, capazes de aumentar o rendimento operacional do equipamento sem trazer prejuízos a sua vida útil. A Figura 2.1 apresenta uma foto de um destes equipamentos em uma área industrial.



Figura 2.1: Foto externa de um forno de unidade de destilação atmosférica de petróleo.

Um forno de destilação é composto por uma câmara inferior, denominada seção de radiação, uma região superior denominada seção de convecção e uma chaminé. Ele é equipado com um sistema de fornecimento de combustível que supre com gás combustível ou óleo combustível seus queimadores e um sistema de tiragem responsável por fornecer o ar e expulsar os gases gerados da combustão, que geralmente inclui um pré-aquecedor de ar (Campos e

Teixeira, 2010). O arranjo típico de um forno de uma planta de destilação de petróleo é esquematizado na Figura 2.2.

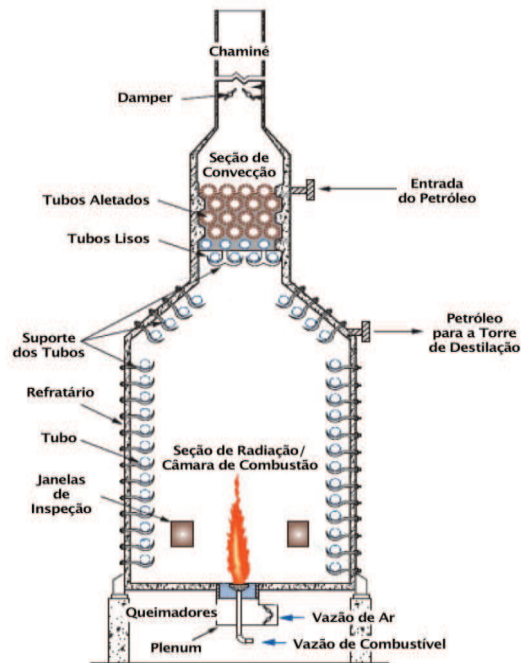


Figura 2.2: Arranjo típico de um forno de uma unidade de destilação de petróleo. Fonte: Adaptado de Vinayagam (2007).

O aquecimento do forno é proveniente dos seus queimadores que são abastecidos com gás ou óleo proveniente de tubulações próprias a cada combustível. O oxigênio necessário à queima de combustíveis é obtido de outro sistema de tubulações (também chamada de *plenum*) por onde o ar é conduzido de maneira natural ou pela ação de compressores.

A temperatura e pressão do ar proveniente do plenum depende do sistema de pré-aquecimento de ar do forno, ou PAF, mas o equipamento também pode admitir ar diretamente da atmosfera, o que reduz consideravelmente sua eficiência. O PAF aproveita o calor proveniente dos gases da combustão que seriam liberados na chaminé para pré-aquecer o ar do forno antes que o mesmo entre na câmara de combustão do equipamento. O sistema opera com dois ventiladores o primeiro com função de soprador e o segundo como exaustor. A Figura 2.3 ilustra como é a configuração deste sistema.

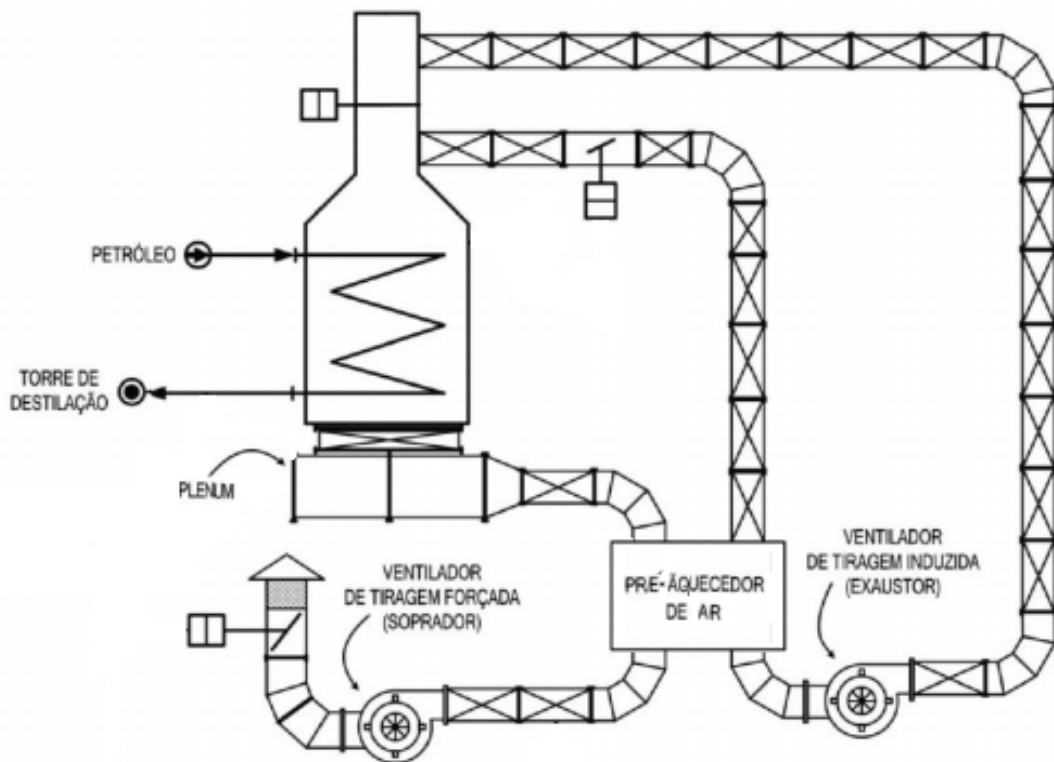


Figura 2.3: Arranjo do pré-aquecedor de ar do forno.

Variações na composição do petróleo e no próprio combustível são comuns na operação destes fornos e, portanto, estes equipamentos precisam se adaptar às mudanças sem comprometer sua estrutura, e operar de maneira satisfatória no processo de destilação. Além da monitoração da temperatura do petróleo, os perfis das temperaturas das superfícies dos tubos no interior de um forno podem determinar condições limitantes à operação destes equipamentos. Temperaturas elevadas em determinadas zonas da câmara de combustão podem levar à formação de coque nas paredes do interior das tubulações ou mesmo à possível ruptura da serpentina de aquecimento. A Figura 2.4 mostra o resultado de um acidente envolvendo este tipo de equipamento.



Figura 2.4: Acidente com forno industrial (Fonte: Petrobras).

A Figura 2.4 ilustra o resultado extremo de uma emergência ocorrida na operação de um forno que operava em uma planta petroquímica. Um acidente nestas proporções, além de representar uma grande perda em termos de recursos, também pode levar à perda de vidas. Assim sendo, fica clara a importância de que os processos operacionais sejam seguidos dentro dos critérios de projeto a fim de prolongar o máximo possível a vida útil destes equipamentos.

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 para que seja possível determinar o perfil de temperaturas no interior das câmaras de combustão e desempenho destes equipamentos.

2.2 SIMULAÇÕES DE PROCESSOS DE COMBUSTÃO PARA FORNOS NA INDÚSTRIA PETROQUÍMICA

A simulação do processo de combustão e trocas térmicas no interior dos fornos industriais é um processo complexo, visto que as dimensões destes equipamentos não permitem um estudo simplificado. Segundo Eaton e Smoot (1999) a complexidade da turbulência e dos processos reativos da combustão em grande escala não permitem que haja uma aplicação direta

dos dados coletados em escala menor. Assim, para o escalonamento entre processo de combustão em menor escala e as grandes câmaras dos fornos, são necessários os métodos específicos.

O primeiro método matemático desenvolvido para a avaliação de projeto de fornos foi apresentado por Lobo e Evans (1939), considerado 0-D e baseado em dados empíricos, utilizava um modelo com coeficiente de troca de calor por convecção fixo à toda a serpentina e considerava a temperatura uniforme para os gases de combustão. Este método foi empregado com sucesso na validação das condições operacionais das primeiras gerações de fornos de refinarias de petróleo. Conforme Lobo (1974), os equipamentos deste período tinham um formato denominado *well-stirred*.

Com o passar do tempo e a evolução da tecnologia o modelo *well-stirred box* fora ultrapassado e a indústria petroquímica passou a utilizar fornos cada vez mais especializados aos processos. Foram incorporadas diversas variações no que diz respeito aos formatos e dimensões destes equipamentos. Estas mudanças implicavam na necessidade de modificações e melhorias nos métodos de projeto e cálculos de condições operacionais. Assim, seguindo ainda no modelo de Lobo e Evans (1939), uma série de modelos matemáticos baseados em dados empíricos foram desenvolvidos ao longo das décadas. Somente após cerca de 35 anos, Hottel (1974) propôs o método de multi-zonas. Neste método o equipamento é dividido em zonas com propriedades iguais. Há necessidade de simplificações em função de singularidades, tais como os tubos. Estes 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 precisam ser conhecidos (obtidos empiricamente). Este método, ainda amplamente empregado, é uma das bases que softwares comerciais utilizam para o estudo de performance na operação de fornos, conforme apresentado por Diaz e Castro (2010).

Juntamente com o método multi-zonas, alguns dos softwares comerciais como o Xfh (HTRI, 2018) se utilizam 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).

O trabalho de Jethva e Bhagchandani (2013) propôs-se a avaliar a divergência dos resultados encontrados pelo software HTRI Xfh 6.0 com os resultados das equações clássicas propostas por Lobo e Evans (1939), resolvidas pelo software Microsoft Excel. A modelagem de um forno foi executada pelos dois métodos e a diferença de resultados para o fluxo de calor

médio para os dois modelos ficou em torno de 11%. Outros fatores também relevantes como a temperatura do petróleo na saída do forno e temperatura dos gases de combustão não diferiram entre os dois modelos. Embora os resultados não terem sido atestados por dados experimentais a visível convergência dos mesmos indica provável sucesso e também reforça que a utilização de modelos baseados em dados empíricos apresenta resultados coerentes.

Oakley (2017) com a versão mais recente do software HTRI Xfh Ultra 1.0 fez simulações de um forno de uma unidade de destilação atmosférica em operação que possuía uma câmara de combustão e uma grande zona de convecção com aletas que operava dentro dos limites seguros. O trabalho identificou que os queimadores, sistemas de ar e combustível poderiam operar com uma taxa transferência de calor 20% maior do que a utilizada como limite até então. Também se verificou que a utilização de taxas de transferência maiores do que estes 20% não seriam aconselháveis devido aos limites de temperatura do material. Este caso mostra como o Xfh pode ser utilizado para avaliar novos cenários operacionais para fornos onde se queira verificar e aumentar sua eficiência, subseqüentes testes na planta ainda precisam ser executados para avaliar o impacto em outros componentes do processo.

Apesar destes softwares, dedicados ao estudo de desempenho de fornos, poderem ser adaptados a diversos modelos destes equipamentos, sua programação restringe-se a análises de algumas condições pré-estabelecidas, como o tipo e o formato do forno, número de queimadores e a disposição dos tubos, por exemplo. E ainda, apesar de poder diferenciar as zonas no interior do forno, este ainda é considerado como um modelo unidimensional, apresentando como resultado o fluxo de calor médio por região sem prever comportamentos pontuais ou poder verificar regiões específicas de um modelo tridimensional.

Atualmente com o avanço da computação e o desenvolvimento de novos softwares, a Fluido dinâmica Computacional, ou CFD, tem ganhado espaço em análises de equipamentos industriais devido a possibilidade de criação de modelos tridimensionais. 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 dados para o comportamento dos campos de temperaturas, de concentrações de espécies químicas e de velocidades dos gases de combustão no interior da câmara de um forno em três dimensões, independentemente da sua aplicação. A versatilidade no desenvolvimento de modelos permite com que estes sejam adaptados a vários tipos de problema de engenharia, desde que sejam aplicadas as devidas condições de contorno. A seguir seguem comentários sobre trabalhos que empregaram modelos tridimensionais em CFD em aplicações de fornos de plantas petroquímicas.

Arrieta, Cadavid e Amell (2011) utilizaram um modelo numérico 3-D com o software Ansys Fluent para simular um forno de pirólise que utiliza metano como combustível. Neste trabalho também não foi considerado a vazão de fluido no interior dos tubos do forno, sendo utilizadas temperaturas fixas para os tubos como condição de contorno para o problema. O trabalho primeiramente consistiu em fazer a simulação do queimador com todas as características dimensionais e operacionais do mesmo, assim foram levantados o perfil de fluxo de calor, turbulência, espécies químicas formadas e perfil de temperatura ao longo do plano central do queimador. A seguir duas simulações foram executadas, a primeira utilizou os dados do queimador para constituir as condições de contorno para uma simulação da câmara do forno sem que houvesse a necessidade de realizar as reações de combustão com escoamento simples de gás aquecido, a segunda simulação utilizou um queimador simplificado onde aí sim foram mantidas todas as reações de combustão e de formação de espécies. Todas as simulações consideraram o escoamento no interior da câmara do forno como turbulento e foi utilizado o modelo κ - ϵ padrão, as reações de combustão foram modeladas utilizando o modelo de Westbrook e Dryer (1981) de dois estágios. As taxas de reação das espécies químicas foram tratadas pelo modelo *Eddy Dissipation* (Ansys, 2015). A comparação entre o modelo proposto no trabalho identificou que as velocidades de fluxo de gases no interior da câmara permaneceram as mesmas para os dois modelos assim como as temperaturas e o fluxo de calor, com uma leve tendência à simulação a apresentar picos de temperatura mais elevados na região da reação de combustão.

Li et al. (2015) em uma modelagem tridimensional de forno de uma unidade de destilação à vácuo simularam os processos de combustão no interior do equipamento também utilizando o modelo de escoamento reativo turbulento, mas com o software Ansys CFX. Seu objetivo foi obter informações detalhadas sobre a velocidade dos gases de combustão, campos de temperatura e concentrações máxicas NO. O modelo k - ϵ padrão foi aplicado à simulação de turbulência e modelo de transferência discreta (DTRM) à transferência de calor por radiação, não foram simuladas as condições dos tubos do forno, assim os autores preferiram utilizar a temperatura dos tubos fixa como uma condição de contorno para o problema. Foram executadas duas simulações para o trabalho, variando o excesso de ar para o forno entre 1,2 e 1,5 verificando que o aumento no excesso de ar torna a distribuição dos campos de velocidade dos gases de combustão uniforme, também se verificou que a temperatura de chama e formação de NO caem com o aumento da disponibilidade de ar.

A utilização de condições de contorno fixas para os tubos de forno é geralmente utilizada devido a complexibilidade dos processos físico químicos que ocorrem no interior dos tubos dos

fornos que por si só demandariam um amplo estudo. Mas a implementação de temperaturas fixas como condição de contorno para os tubos dos fornos, como mostrado nos trabalhos descritos acima, é uma estratégia que depende de dados externos à simulação em CFD, se estes dados forem obtidos da operação de um equipamento real sua confiabilidade dependerá dos dispositivos utilizados para sua medição, mas estes dados também podem ser calculados muitas vezes por softwares específicos para esta função como foi executado nos trabalhos à seguir.

Diaz e Castro (2010) obtiveram sucesso ao utilizar o simulador dedicado EcoFursim desenvolvido pelo *Instituto Colombiano de Petróleo (ICP)* para identificar o fluxo de calor para tubos de um forno de uma refinaria colombiana e também calcular a temperatura de tubos de fornos para plantas petroquímicas. O software utilizou o método multi-zonas e a norma API 530 para determinar o fluxo de calor para os tubos e estes dados foram utilizados como condição de contorno para uma simulação numérica com o software comercial Ansys Fluent. Um modelo tridimensional foi desenvolvido sendo composto por 2 queimadores localizados no centro do equipamento, foi simulado um fluxo reativo turbulento no interior da câmara de combustão utilizando o modelo κ - ϵ padrão e as reações químicas utilizaram o modelo *Finite Rate Chemistry* e *Eddy Dissipation* (Ansys, 2015). O modelo de radiação empregado foi o WSGG desenvolvido por Hottel e Sarofim (1967). Os resultados das simulações nos softwares EcoFursim e Ansys Fluent foram comparados com dados da temperatura do forno em operação, sendo identificado que o EcoFursim não pode identificar picos de temperatura na superfície dos tubos do forno apresentando um erro médio de 9% enquanto a simulação com Ansys Fluent diferiu 2% em média.

Ainda dentro do contexto, Stefanidis et al. (2006) propuseram a utilização de um modelo tridimensional de uma câmara de combustão de um forno de unidade de craqueamento para simulação dos campos de velocidade, temperatura, concentração de espécies e radiação, sem simulação do efeito nos tubos do equipamento. Os softwares empregados pertencem ao Laboratório de Engenharia Petroquímica, localizado na Bélgica. A tarefa de simulação foi dividida em três partes, a primeira, fez a simulação das reações de craqueamento do produto através de um modelo próprio do software CRACKSIM, a segunda etapa, calculou o fluxo de calor para os tubos do forno com o software COILSIM e a terceira parte, executou as simulações em CFD do escoamento reativo na câmara de combustão com o software FLOWSIM. Na simulação com CFD dois mecanismos de combustão foram comparados, um simples com três reações e um detalhado com trinta e cinco reações, chegando à conclusão que o segundo modelo apresentou resultados mais próximos do esperado.

Os trabalhos acima descritos mostram diferentes aplicações para simulações em processos da indústria petroquímica e também utilizam diferentes softwares para executar a simulação de fornos para a indústria petroquímica. Uma característica comum a estes trabalhos e a tanto outros é que seus processos utilizam tubos com algum produto escoando através deles que está sendo aquecido ou sofre alguma reação em função de aquecimento no interior de uma câmara de combustão e a troca de transferência de calor precisou ser simulada por um método à parte do CFD. Este é um aspecto importante a ser ressaltado, com o aquecimento do produto no interior dos tubos algumas reações físico químicas ocorrem mudando as propriedades do fluido e conseqüentemente do escoamento que pode tornar-se bifásico no caso de vaporização parcial como acontece no caso do processamento do petróleo.

Heynderickx *et al.* (2001), Oprins e Heynderickx (2003), Habibi, Merci e Heynderickx (2007) utilizaram para simulação de fornos de craqueamento à vapor a mesma metodologia para simulação do processo: modelagem da câmara de combustão, aplicando modelos de escoamento turbulento, radiação e formação de espécies químicas, quanto ao processo de craqueamento que ocorre no interior dos tubos do forno este foi executado em simulações separadas do CFD cujos resultados para o fluxo de calor em cada tubo era então inserido no modelo tridimensional. Os cálculos para a transferência de calor para os tubos nestes trabalhos foram feitos por modelos baseados no método das zonas de Hottel e Sarofim (1967).

Estratégias de modelagem como as descritas acima tem por interesse manter o foco das pesquisas na simulação numérica do escoamento reativo no interior das câmaras de combustão simplificando o estudo. Paralelo a estes trabalhos, de maneira semelhante a complexidade do escoamento no interior dos tubos dos fornos também pode ser representada em modelos desenvolvidos em CFD.

2.3 SIMULAÇÕES DE ESCOAMENTO EM TUBOS DE EQUIPAMENTOS DA INDÚSTRIA PETROQUÍMICA

A seguir são apresentados alguns recentes trabalhos que utilizaram o CFD para modelar o escoamento no interior dos tubos de equipamentos da indústria petroquímica. Estes trabalhos foram utilizados como base para o entendimento e construção do modelo de numérico utilizado para as simulações deste trabalho.

Souza et al. (2006) em seu trabalho apresentou um modelo para prever a formação de coque devido ao craqueamento térmico do resíduo pesado de petróleo proveniente da coluna de

destilação a vácuo dentro de tubos de um forno de refinaria. A previsão é baseada em um modelo axi-simétrico bidimensional CFD (*Computational Fluid Dynamics*). Escoamento laminar e turbulento foram analisados para várias especificações de fluxo de massa e temperatura. O petróleo foi representado por um modelo de sete pseudo-componentes que foram dissolvidos na fase líquida (petróleo) na entrada do tubo. O modelo resolve numericamente a forma discreta as equações para a massa, momento e conservação de energia. As propriedades físicas dependem da temperatura devido ao alto gradientes de temperatura dentro destes tubos. Para prever a formação de coque na simulação, foi utilizado no modelo um diagrama ternário para testar a precipitação de asfaltenos de pseudo-componentes (apenas asfaltenos pode levar a formação de coque). A câmara de combustão não foi simulada e foi utilizado para o tubo temperatura constante como condição de contorno, as equações do modelo levam em consideração não apenas as variações radiais e axiais da temperatura do fluido, velocidade e concentrações, mas também considera viscosidade, densidade, capacidade térmica e condutividade térmica dependente da temperatura. Dentre os resultados encontrados se verificou que o perfil de temperatura do petróleo no interior do tubo não mudou para os dois tipos de escoamento simulados atingindo temperaturas em torno de 700 K junto à parede do tubo enquanto que no centro o fluido chegava a 300 K. A formação de coque nos tubos se mostrou maior junto as paredes do tubos para ambos os modelos de escoamento selecionados, mas no escoamento laminar este coque já começa a se formar próximo ao centro do tubo enquanto que no escoamento turbulento só é visto sua formação a partir do meio do raio do tubo. Os resultados do estudo não foram comparados com resultados experimentais.

Bayat et al. (2012) em um estudo com simulações em duas dimensões de escoamento em um tubo de trocador de calor de petróleo utilizando o CFD, mostrou que o fluido, em função da alta viscosidade, apresenta uma alta tensão cisalhante junto à parede do tubo por onde escoava, favorecendo a incrustação por depósito de particulados que se precipitam ao longo do tempo. Para a simulação foram utilizadas velocidade e temperatura uniformes para o fluido na entrada, o fluxo de calor convectivo fixo foi utilizado com um valor de h médio calculado independentemente da simulação baseado em dados operacionais de um trocador de calor localizado em uma refinaria do Irã. Foi aplicado um modelo de transporte de espécies químicas a fim de simular a mistura dos componentes no interior do tubo e escoamento turbulento. A composição do petróleo foi simulada com a utilização de três pseudo-componentes: óleo, sal e asfaltenos. A perda de carga devido a incrustação foi simulada para períodos de operação entre quinhentas e duas mil horas de operação e então comparados com dados do trocador utilizado como modelo, apresentando resultados semelhantes para perda de carga para simulações a partir

de mil e quinhentas horas. Os modelos não mostram perda de carga significativa antes de mil horas de operação, diferentemente dos dados operacionais que já mostram grandes perdas de carga a partir de duzentas horas de operação.

Cui et al. (2012) simulou o escoamento de uma mistura de hidrocarbonetos no interior de um tubo inclinado em um modelo bidimensional, executado pelo software Ansys Fluent. O modelo desenvolvido utilizou um escoamento bifásico do fluido assumindo equilíbrio entre as fases líquido-vapor usando equações de Peng-Robinson e um modelo de escoamento turbulento. As misturas de hidrocarbonetos em ambas as fases foram descritas com cinco pseudo-componentes e as características de condutividade de calor, viscosidade, tensão superficial e pressão de vapor foram definidas a partir de dados do Instituto Americano do Petróleo (API). As propriedades de equilíbrio líquido-vapor nas interfaces vapor-líquido ou vapor/gás - líquido e termos de todas as equações de transporte precisaram ser adicionados ao CFD como funções definidas, assim também concedendo ao modelo um efeito de destilação à mistura de hidrocarbonetos. As simulações para o sistema binário mostraram semelhante tendência dos números de Sherwood entre os resultados encontrados e os previstos pela teoria. Para a fase vapor se verificou boa concordância entre os resultados das simulações e resultados empíricos.

No trabalho de Li et al. (2015) desenvolveu-se em um modelo em CFD, utilizando o Software Ansys CFX 14.0, tridimensional capaz de prever mudanças de fase e reações no interior de tubos de fornos de aquecimento de petróleo. O modelo foi construído com base no modelo de Euler onde a fase líquida é tratada como fase contínua enquanto as fases gasosa e sólida são consideradas como fases dispersas, todas as fases foram tratadas com equações de transporte separadas entre si. O escoamento do fluido foi tratado como turbulento através do modelo $k-\epsilon$ padrão e modelo tridimensional do tubo apresentou boa convergência para malhas com $1,8 \times 10^6$ células. Como resultado obteve-se a distribuição de temperatura do fluido ao longo de todo o tubo estudado, a separação das fases líquido-vapor e formação de coque para diferentes tipos de petróleo e temperaturas de parede dos tubos. Os resultados das simulações indicaram a mudança de fase do petróleo tem grande impacto na transferência de calor entre o fluido e as paredes do tubo. Petróleos que tem composição com hidrocarbonetos mais voláteis em maior quantidade tem maior percentual de espécies na fase gasosa e temperatura do fluido mais baixa do que petróleos com menor percentual de voláteis em sua composição.

Como visto nos trabalhos acima o desenvolvimento de modelos para o escoamento no interior de equipamentos de plantas petroquímicas é uma tarefa complexa. A composição do fluido dificulta este tipo de simulação por apresentar mais de um componente e estes muitas

vezes apresentam características diferentes entre si, resultando em depósitos e incrustações, além do escoamento por vezes ser multifásico. A complexidade destas simulações tende a aumentar e exigir modelos com malhas mais aprimoradas quando se quer desenvolver um modelo tridimensional. Assim sendo a simulação de um forno com os tubos da serpentina de aquecimento pode vir a se tornar um projeto computacionalmente inviável para as máquinas atuais.

2.4 MODELOS EM CFD UTILIZADOS PARA A SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE ESCOAMENTO REATIVO

Simulações de processos de combustão ou escoamento reativo são processos complexos, que exigem um bom conhecimento tanto da teoria dos modelos utilizados como também do processo o qual se tem por interesse simular. A partir esta parte do capítulo serão tratados os métodos utilizados para executar as simulações dos processos de combustão no interior da câmara de combustão do forno utilizado no trabalho.

Os processos de combustão são apresentados em muitos trabalhos que utilizaram simulações numéricas para escoamento reativo, diversos autores apresentam soluções próprias de cálculos das equações necessárias para a solução do problema e muitos trabalhos também relatam soluções encontradas com a utilização de softwares comerciais de CFD.

Os dados experimentais do trabalho de Garréton e Simonin (1994 com uma câmara de combustão são utilizados até hoje para a validação de modelos matemáticos para a combustão de metano, apesar das próprias simulações executadas por eles com diversos softwares comerciais modelados a partir desta câmara na época não serem representativos.

Magel et al. (1996) estudou a câmara de Garréton e Simonin (1994) desenvolvendo um modelo numérico de processo de combustão turbulento. Seu trabalho utilizou o conceito do modelo *Eddy Dissipation Concept* para simular reações químicas de combustão turbulenta com gases sem pré-mistura. A radiação térmica e formação de NO também foram obtidos neste trabalho obtendo boa concordância com os dados experimentais.

Isnard e Gomes (1999) para o mesmo problema de câmara de combustão, simularam em um modelo bidimensional a turbulência do processo de escoamento reativo utilizando o modelo $k-\varepsilon$, reação de combustão em dois passos com o modelo de transferência discreta de radiação (DTRM). Os resultados obtidos foram satisfatórios e demonstraram que a utilização

de um modelo de dois passos melhora a previsão de formação de CO e conseqüentemente uma maior precisão no perfil de temperatura no interior da câmara.

Nickele et al. (2002) simularam a câmara de Garréton e Simonin (1994) com o software de CFD Ansys Fluent. Neste trabalho para a simulação do processo de radiação o modelo DTRM foi acoplado ao modelo de soma ponderada de gases cinza (WSGG) e o mecanismo de combustão foi considerado de dois passos, obtendo com isto excelentes resultados quando comparados aos dados experimentais.

Os modelos de radiação têm grande importância na determinação de resultados das simulações numéricas. O modelo WSGG, desenvolvido por Hottel e Sarofim (1967), visa substituir a variação espectral do coeficiente de absorção por um pequeno número de gases cinzas, estes coeficientes, de origem experimental, foram determinados por Hottel e Sarofim (1967), depois atualizados por Smith et al. (1982) sendo utilizados até recentemente quando Dorigon et al. (2013) propôs nova atualização de seus valores. Atualmente os coeficientes determinados por Dorigon et al. (2013) são os mais confiáveis para serem aplicados no modelo WSGG pois seus valores foram obtidos através do estudo da base de dados HITEMP 2010, Rothman et al. (2010), que é a base de dados espectrais mais recente.

Centeno et al. (2012) novamente com a câmara de Garréton e Simonin (1994), utilizou a combustão de metano com ar para comparar resultados da radiação calculada pelo modelo WSGG utilizando os coeficientes de Smith et al. (1982) com os coeficientes encontrados por Dorigon et al. (2013). No estudo se verificou que os resultados das temperaturas encontrados pelo modelo que utilizou os novos coeficientes propostos apresentaram maior proximidade dos valores experimentais de Garréton e Simonin (1994). Silva et al. (2013) realizaram o estudo de combustão de gás natural na câmara de combustão de Garréton e Simonin (1994) em uma simulação numérica tridimensional com o software Ansys CFX. O trabalho verificou o efeito do empuxo sobre o escoamento, temperatura e espécies químicas. Comparando os resultados obtidos em simulações com e sem a força de empuxo nos cálculos se verificou que a força de empuxo não influenciava significativamente nos resultados obtidos.

3 MATERIAIS E MÉTODOS

A modelagem em CFD aplicada neste trabalho, é baseada em trabalhos de simulação numérica já desenvolvidos em diferentes problemas de combustão. Com a utilização do software Ansys CFX 18.1, o processo de combustão no interior do forno foi descrito por uma série de modelos que se inter-relacionam, sendo a sua seleção capaz de prever praticamente todos os fenômenos ligados à físico-química do escoamento reativo e não isotérmico avaliado.

Para o forno utilizado neste trabalho optou-se por utilizar o modelo $k-\varepsilon$ padrão para a simulação dos fenômenos ligados ao escoamento turbulento no interior da câmara de combustão. A taxa das reações de combustão é calculada pelos modelos *Eddy Dissipation Model* (EDM) (Ansys, 2015) e *Finite Rate Chemistry* (FRC) (Ansys, 2015) enquanto que o modelo Westbrook-Dryer (1981) de dois passos (WD2) determina a oxidação do combustível. A transferência de calor por radiação foi simulada através dos modelos de transferência de radiação discreta (DTRM) (Lockwood e Shah, 1981) e da soma ponderada de gases cinza (WSGG) (Ansys, 2015) para a determinação do coeficiente de absorção do meio participante. A modelagem também prevê os cálculos para a formação de NO através dos mecanismos de Zeldovich (Ansys, 2015) e de Fenimore (Fenimore, 1971).

As condições de contorno aplicadas na modelagem foram obtidas a partir de dados de projeto de um forno que opera atualmente em uma indústria petroquímica na região sul do país. Assim, foram utilizadas as dimensões do equipamento, número de tubos na serpentina de aquecimento de petróleo e número de queimadores. Os dados operacionais tais como as vazões de ar e de combustível foram obtidos na base de dados que contém o histórico operacional do equipamento.

Em função das grandes dimensões do equipamento e considerando a complexidade dos processos de combustão e trocas de calor no interior da câmara de combustão do forno optou-se por limitar a simulação do forno à sua zona de radiação e, aproveitando as condições simétricas do equipamento, o domínio computacional pôde ser reduzido à $\frac{1}{4}$ do volume original. Como consequência destas simplificações foi necessário adequar condições de contorno relativas às vazões de ar e gás combustível também a $\frac{1}{4}$ dos valores utilizados no equipamento original.

Também neste capítulo apresenta-se uma descrição do software HTRI Xfh, que é uma ferramenta de simulação de fornos baseada no método multi-zonas. Sua utilização neste trabalho foi necessária para determinar o coeficiente de troca de calor dos tubos da serpentina de aquecimento de petróleo. Apesar de apresentar mais restrições do que o CFD no que diz

respeito ao dimensionamento do forno, seu conjunto de equações empíricas leva em consideração a composição do combustível e da curva TBP (*True Boiling Point*) do petróleo para a determinação do fluxo de calor e a temperatura na superfície dos tubos. O software HTRI Xfh utilizou como dados de entrada o gás metano como combustível e o petróleo nigeriano Bonga, com Grau API 29,4 semelhante ao utilizado no forno estudado, para calcular o fluxo de calor médio dos tubos.

O fluxograma mostrado na Figura 3.1 mostra o fluxo para o desenvolvimento do modelo.

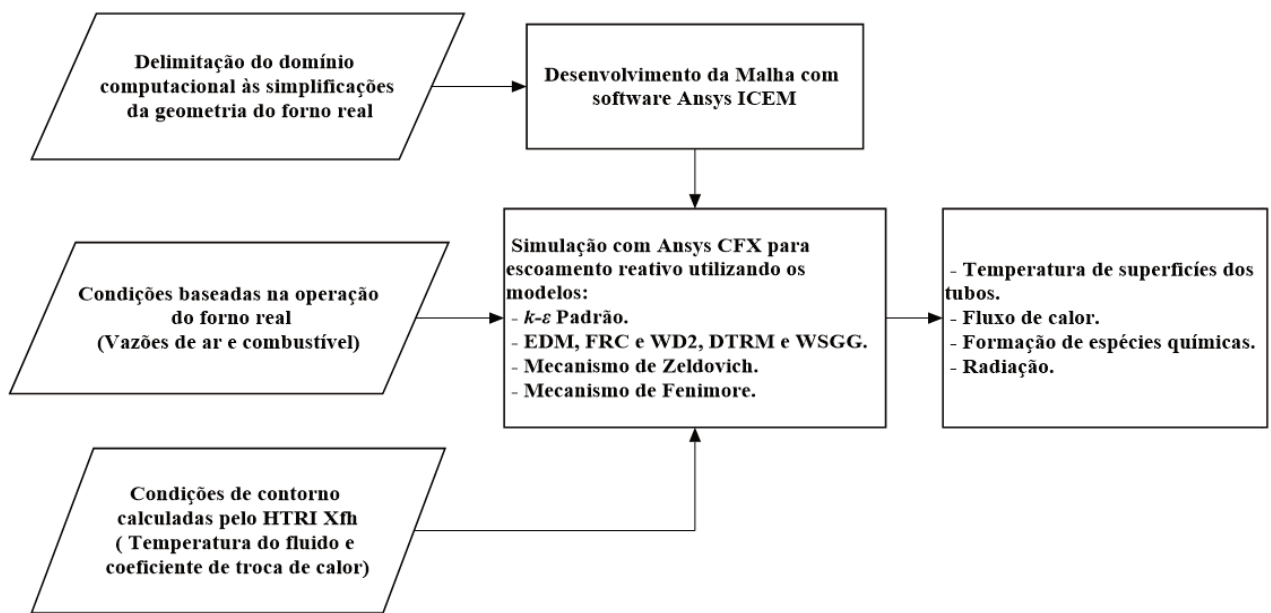


Figura 3.2: Fluxograma do desenvolvimento do modelo desenvolvido.

3.1 MODELAGEM DO ESCOAMENTO TURBULENTO E REATIVO

A modelagem para escoamento em CFD é baseada na resolução das equações que governam os fenômenos de transporte através do Método dos Volumes Finitos (MVF). O MVF proposto por Patankar (1980), é definido como a integração no espaço e no tempo das equações diferenciais na forma conservativa em cada um dos volumes de controle. Este capítulo apresenta estas equações diferenciais que foram utilizadas na modelagem do trabalho.

Processos de combustão apresentam características particulares quando se trata do estudo da turbulência. Para a simulação do forno foi utilizado modelo $k-\varepsilon$ padrão (Launder e Spaulder, 1974) em conjunto com funções de parede escalonáveis (Ansys, 2015). Esta

configuração é a mais utilizada por ser robusta e de baixo custo computacional. Li et al. (2015) aplicaram esta configuração em simulações dos processos de combustão em fornos de unidades de vácuo com software CFX 14.0 obtendo bons resultados para o escoamento de gás no interior destes equipamentos. A simulação do escoamento turbulento e reativo, através do Método dos Volumes Finitos (MVF), encontra uma solução para o problema da turbulência e da flutuação da massa específica utilizando-se de dois métodos conhecidos, o das médias de Reynolds (RANS – *Reynolds Averaged Navier-Stokes*) (Maliska, 2012) e o das médias de Favre (Peters, 2006). 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

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (3.1)$$

Em chamas turbulentas ocorrem flutuações na massa específica devido à energia térmica liberada e, 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

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' \quad (3.2)$$

onde $\overline{\rho\phi''} = 0$.

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

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \tilde{P}}{\partial x_i} \delta_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) - \overline{\rho u_i'' u_j''} \right] + S_u \quad (3.4)$$

onde $\bar{\rho}$ 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

$$-\overline{\rho u_i'' u_j''} = \mu_t \left[\left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right] - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \delta_{ij} \quad (3.5)$$

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

$$k = \frac{1}{2} \overline{(u_i'' u_i'')} = \frac{1}{2} \left(\overline{u''^2} + \overline{v''^2} + \overline{w''^2} \right) \quad (3.6)$$

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). As equações que definem o modelo k - ε para a viscosidade cinemática turbulenta são

$$\mu_t = \frac{C_\mu \bar{\rho} k^2}{\varepsilon} \quad (3.7)$$

para a energia cinética turbulenta

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_j k)}{\partial x_j} = -\overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] - \bar{\rho} \varepsilon \quad (3.8)$$

para dissipação da energia cinética turbulenta

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\varepsilon)}{\partial x_j} = -C_{1\varepsilon}\frac{\varepsilon}{k}\overline{\rho u_i''u_j''}\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} - C_{2\varepsilon}\bar{\rho}\frac{\varepsilon^2}{k} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}\right)\frac{\partial\varepsilon}{\partial x_j}\right] \quad (3.9)$$

Para fechamento das equações, o modelo k - ε utiliza constantes previamente definidas que seguem na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 - Constantes para o modelo k - ε 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 |

Fonte: Ansys 2017

3.2 MODELAGEM DA COMBUSTÃO

O modelo numérico proposto para representar as reações químicas da combustão baseia-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 EDC (*Eddy Dissipation Concept*) baseado no trabalho de Magnussen e Hjertager (1977) e FRC (*Finite Rate Chemistry*) apresentado em Kuo (2005) e Turns (2000). 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) tenham 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. A variação de densidade afeta diretamente a conservação de massa. A equação de conservação de massa de cada componente descrita pela notação tensorial sem a dependência do tempo pode ser descrita da seguinte forma

$$\frac{\partial(\tilde{\rho}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\tilde{\rho}_i (\tilde{u}_{ij} - \tilde{u}_j) - \overline{\tilde{\rho}_i u_j} \right] + S_i \quad (3.10)$$

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

$$S_i = \overline{MM}_i \sum_{k=1}^n (\eta_{kl}'' - \eta_{kl}') R_k \quad (3.11)$$

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 tradução livre 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

$$R_k = \left(F_K \prod_{I=A,B,\dots}^{N_c} [I]^{r_{kl}'} - B_K \prod_{I=A,B,\dots}^{N_c} [I]^{r_{kl}''} \right) \quad (3.12)$$

onde $[I]$ representa a maior concentração molar do componente I , 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

$$F_k = A_K T^\beta \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) \quad (3.13)$$

$$B_k = A_K T^\beta \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) \quad (3.14)$$

onde A_K é o coeficiente pré-exponencial, β é o expoente de temperatura, 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

$$R_K = A \left(\frac{\varepsilon}{\kappa}\right) \min\left(\frac{[I]}{\eta'_{k,l}}\right) \quad (3.15)$$

onde A é um reagente, $[I]$ 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

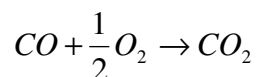
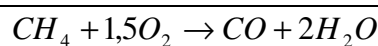
$$R_K = AB \left(\frac{\varepsilon}{\kappa}\right) \frac{\sum_P [I] MM_I}{\sum_P \eta''_{kl} MM_I} \quad (3.16)$$

onde A e B são os reagentes.

O modelo misto de EDM e FRC adotado neste trabalho utiliza as menores das taxas de reação calculadas pelos dois modelos como R_k (Ansys, 2016).

As reações para a combustão do metano estão presentes nas bibliotecas próprias a este combustível no CFX. O mecanismo de oxidação de metano utilizado no trabalho é o Westbrook-Dryer (1981) com um e dois passos globais (WD2). A reação pode ser verificada na Tabela 3.2.

Tabela 3.2 Mecanismo de WD2 para oxidação do metano



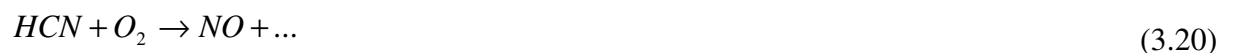
Fonte: Westbrook e Dryer (1981)

3.3 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 1800 K, ocorre em função da abundante presença de radicais O e N em altas temperaturas, chamado de mecanismo de Zeldovich (Kuo, 2005) que tem a forma



Também há grande formação de NO em regiões do processo de combustão do metano onde a temperatura inferior à 1800 K, 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 Instantâneo (*prompt*). Assim,



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

$$S_{NO,t} = 2M_{NO}k_t[O][N_2] \quad (3.21)$$

$$S_{NO,p} = M_{NO} k_p [O_2]^{1/2} [N_2] [CH_4] \left(\frac{W}{\rho} \right)^{3/2} \quad (3.22)$$

onde W é a massa molecular 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

$$k = A e^{-T_a/T} \quad (3.23)$$

onde A é o fator pré exponencial.

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 3.3.

Tabela 3.3 Coeficientes de k_t e k_p e temperatura de ativação da equação de Arrhenius.

| Constantes de velocidade de reação | A (1/s) | Temperatura de ativação T_a (K) |
|---------------------------------------|----------------------|--------------------------------------|
| k_t | $1,8 \times 10^{11}$ | 38370 |
| k_p | $6,4 \times 10^6$ | 36510 |

Fonte: Ansys 2017

3.4 EQUAÇÃO DA CONSERVAÇÃO DA ENERGIA

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

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i h_{tot}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\lambda \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right] + \bar{S}_{rad} + \bar{S}_{rea} + \bar{S}_t \quad (3.24)$$

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

$$\bar{S}_{rea} = \sum_{\alpha} \left(\frac{h_{\alpha}^0}{MM_{\alpha}} + \int_{\tilde{T}_{ref,\alpha}}^{\tilde{T}} c_{p,\alpha} d\tilde{T} \right) \times \bar{R}_{\alpha} \quad (3.25)$$

onde α é uma espécie química, h_{α}^0 é a entalpia de formação específica, MM_{α} 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}_{α} é a taxa volumétrica de formação/destruição de cada espécie química que é dado por:.

$$\bar{R}_{\alpha} = \sum_k R_K \quad (3.26)$$

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.

3.5 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, através de solução da Equação de Transferência Radiante (RTE - *Radiative Transfer Equation*) (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 RTE para um meio em equilíbrio dinâmico local pode ser escrita como

$$\frac{dI_v(\vec{r}, \vec{s})}{ds} = -(K_{av} + K_{sv})I_v(\vec{r}, \vec{s}) + K_a I_b(v, T) + \frac{K_{sv}}{4\pi} \int dI_v(\vec{r}, \vec{s}') \Phi(\vec{s} \cdot \vec{s}') d\Omega' + S_o \quad (3.26)$$

onde I_v 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 é a função de fase de espalhamento e 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 Soma Ponderada de Gases Cinza (WSGG) (*Weighted Sum of Gray Gases*) (Hottel e Sarofim, 1967) para a determinação do coeficiente de absorção do meio participante.

3.5.1 Modelo DTRM

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

$$\frac{dI_v(\vec{r}, \vec{s})}{ds} + k_a I_v = \frac{k_a \sigma T^4}{\pi} \quad (3.27)$$

onde σ é a constante de Stefan-Boltzmann dada por $5,67 \times 10^{-8} [\text{W}/(\text{m}^2 \text{K}^4)]$, I_v 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 método de volumes finitos assumindo que o espalhamento no interior da câmara é isotrópico, assim a Equação 3.26 pode ser simplificada para

$$\frac{dI_v(\vec{r}, \vec{s})}{ds} = \left[- (K_{av} + K_{sv}) I_v(\vec{r}, \vec{s}) + K_{av} I_b(\nu, T) + \frac{K_{sv}}{4\pi} \int I_v(\vec{r}, \vec{s}') d\Omega' + S \right] \quad (3.28)$$

e como o software considera o sistema é homogêneo, tem-se que

$$I_v(\vec{r}, \vec{s}) = I_{v0} e^{-(K_{av} + K_{sv})S} + I_{bv}(1 - e^{-K_a S}) + K_{sv} \bar{I}_v \quad (3.28)$$

onde I_{v0} é a intensidade de radiação saindo da fronteira e \bar{I}_v é a intensidade de radiação média.

Para a determinação da absorção e emissão volumétricas ainda são necessários cálculos adicionais dependentes do comprimento de onda da radiação, para isso neste trabalho, utilizou-se o modelo de soma ponderada de gases cinza (WSGG).

3.5.2 Modelo WSGG

A modelagem do coeficiente de absorção do meio participante feita pelo modelo WSGG opera de maneira acoplada nos cálculos de radiação no CFD.

A escolha do modelo WSGG se deve a precisão em simulações unidimensionais com mistura de gases como H₂O e CO₂ para proporções encontradas na combustão de metano com ar como visto no trabalho de Dorigon et al. (2013) e Becher et al. (2012).

O modelo WSGG desenvolvido por Hottel e Sarofim (1967) considera o meio participante como uma mistura de gases cinzas com coeficientes de absorção constantes associados a fatores de ponderação. Dentro da formulação padrão do modelo esses fatores de ponderação são dados para uma relação de pressões parciais fixas de CO₂ e H₂O. Segundo o modelo a emitância ao longo de um caminho pode ser dada por

$$\varepsilon(S) = \sum_{i=0}^{NG} a_j(T) (1 - e^{-k_j S}) \quad (3.29)$$

onde k_j é o coeficiente de absorção do gás e $a_j(T)$ é o fator de ponderação da emitância correspondente ao j -ésimo gás cinza e NG é o número de gases cinza considerados, sendo que $j=0$ representa a janela espectral onde tanto o CO₂ quanto o H₂O são transparentes à radiação. O coeficiente de absorção depende da temperatura, pressão e composição do gás. O coeficiente a_j representa a fração de energia de um corpo negro na região do espectro correspondente ao coeficiente k_j do gás cinza. Segundo Smith et al. (1982) os coeficientes de $a_j(T)$ podem ser representados por meio de uma função polinomial de ordem $i-1$ da temperatura, da forma

$$a_j(T) = \sum_{i=1}^I b_{j,i} T^{i-1} \quad (3.30)$$

onde $I-1$ é o grau do polinômio e $b_{j,i}$ o seu coeficiente.

Os coeficientes k_j e $b_{j,i}$ utilizados para os modelos WSGG neste trabalho foram retirados do trabalho de Dorigon et al. (2013) por serem valores atualizados, cujas origens provêm do banco de dados HITEMP 2010, apresentado em Rothman et al. (2010). Estes coeficientes já foram utilizados no trabalho de Centeno et al. (2012) no estudo dos efeitos da radiação na combustão de uma câmara cilíndrica com difusão turbulenta de metano e ar, baseado no trabalho de Garréton e Simonin (1994), aplicando no modelo WSGG foi observado que os resultados numéricos que utilizaram os coeficientes de Dorigon et al. (2013) estavam mais próximos dos dados experimentais publicados por Garréton e Simonin (1994) do que o caso com os coeficientes clássicos.

Os coeficientes a_j e $b_{j,k}$ para combustão de metano encontrados por Dorigon et al. (2013) para 4 gases cinza estão apresentados na Tabela 3.4 para $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$.

Tabela 3.4: Coeficientes para WSGG para $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$

| j | k_j | $b_{j,1}$ | $b_{j,2}$ | $b_{j,3}$ | $b_{j,4}$ | $b_{j,5}$ |
|-----|---------|-----------|------------|------------|------------|------------|
| 1 | 0,192 | 5,617E-02 | 7,884E-04 | -8,563E-07 | 4,246E-10 | -7,440E-14 |
| 2 | 1,719 | 1,426E-01 | 1,795E-04 | -1,077E-08 | -6,971E-11 | 1,774E-14 |
| 3 | 11,370 | 1,362E-01 | 2,574E-04 | -3,711E-07 | 1,575E-10 | -2,267E-14 |
| 4 | 111,016 | 1,222E-01 | -2,327E-05 | -7,492E-08 | 4,275E-11 | -6,608E-15 |

Fonte: Dorigon et al. (2013)

3.6 DESENVOLVIMENTO DO DOMÍNIO COMPUTACIONAL

3.6.1 Dados do equipamento modelo

O forno modelo deste trabalho possui tubos horizontais, duas seções de radiação separadas por uma parede central, uma seção de convecção e uma saída dos gases para o pré-aquecedor de ar. Cada seção de radiação é provida de 15 queimadores verticais para a queima de gás combustível. O arranjo da câmara de combustão pode ser visto na Figura 3.2 e as dimensões externas do equipamento na Figura 3.3.

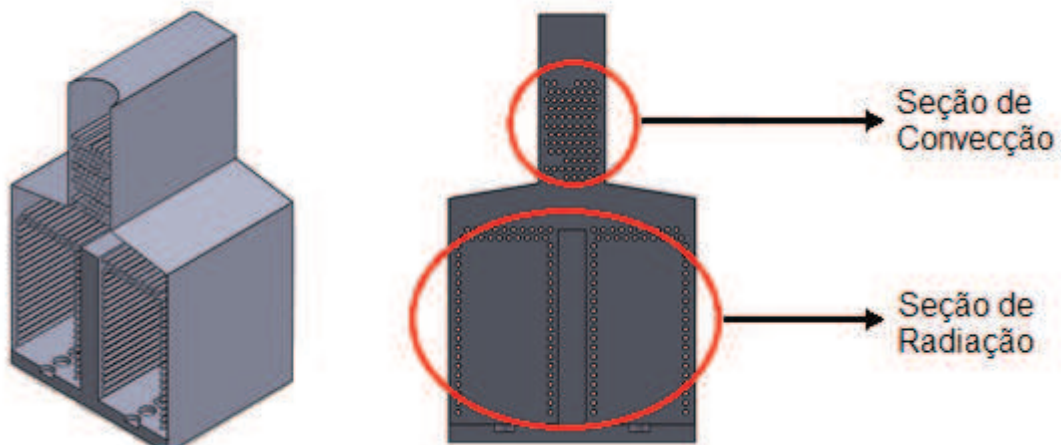


Figura 3.2: Vistas internas do forno

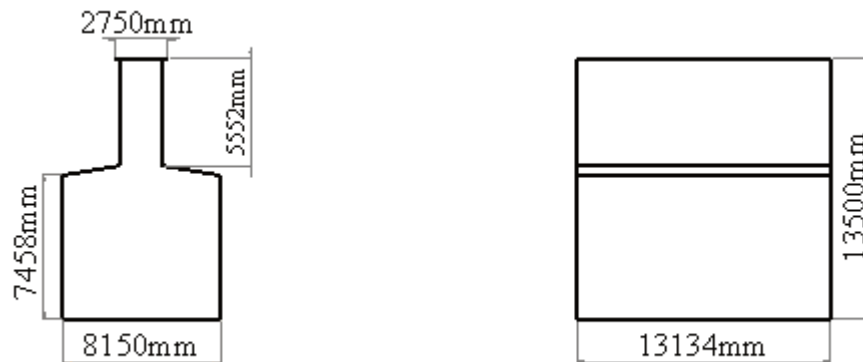


Figura 3.3: dimensões externas do forno modelado, vistas frontal e lateral direita

O forno possui uma camada de material refratário de 70 mm que visa reduzir ao mínimo as perdas de calor através da superfície do equipamento. Este revestimento é encontrado nas paredes internas desde a base do equipamento até a sua chaminé.

Os tubos no interior do forno ficam em contato com os gases da combustão e recebem o calor radiante quando o mesmo se encontra em operação. Cada tubo possui 168,3 mm de diâmetro, 8 mm de espessura e 13410 mm de comprimento interligados entre si por curvas de 180° externas ao equipamento. Os tubos no interior do equipamento estão divididos em 4 conjuntos ou passes, cada passe possui 19 tubos na seção de convecção e 29 tubos na de radiação. Durante a operação do forno a vazão de petróleo primeiramente passa pelos tubos topo da seção de convecção em cada um dos passes de forma paralela, a seguir o fluxo é direcionado por tubulações externas à parte mais baixa da seção de radiação, percorrendo-a de baixo para cima e, por fim, o fluxo de petróleo deixa o equipamento no topo da seção de

radiação para então os quatro passes do forno serem reunidos e o fluido aquecido possa ser direcionado ao restante do processo de refino.

O forno possui 30 queimadores distribuídos de maneira simétrica e igualmente espaçados em duas fileiras localizadas na base do equipamento. Os queimadores são responsáveis pela combustão do combustível no interior da câmara e precisam operar com as mesmas vazões de ar e combustível para garantir chamas homogêneas no interior do equipamento. Cada queimador possui uma entrada de ar primário, uma de ar secundário e seis entradas de combustível, estas denominadas lanças ou canetas de combustível.

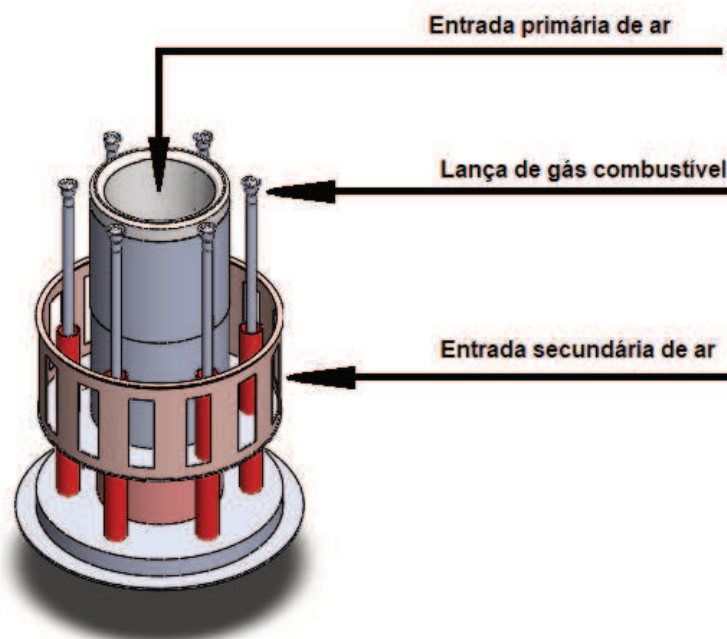


Figura 3.4: Construção individual dos queimadores

A entrada de ar primário existente em cada queimador tem a função de misturar diretamente o ar com o combustível e o ar secundário tem a função de completar a queima do combustível e confinar a chama numa região desejada. Tanto o ar primário quanto o ar secundário de todos os queimadores do forno compartilham as mesmas características de temperatura e pressão pois tem como entrada a mesma câmara localizado abaixo do forno denominada *plenum*. A temperatura e pressão do ar proveniente do *plenum* depende do sistema de pré-aquecimento de ar do forno, ou PAF, mas o equipamento também pode admitir ar diretamente da atmosfera, o que reduz consideravelmente sua eficiência.

3.6.2 Condições operacionais

As condições operacionais do forno podem variar de acordo com a vazão de carga, composição do petróleo e do combustível e precisam respeitar os limites operacionais do equipamento. As condições utilizadas como base para este trabalho foram retiradas do histórico operacional do equipamento, estas condições operacionais estão descritas na Tabela 3.5.

| | |
|---|---------------------------|
| Vazão de combustível | 1,2 kg/s |
| Temperatura do combustível | 300,15 K |
| Vazão de ar | 19,2 kg/s |
| Temperatura do ar pré-aquecido | 543,15 K |
| Pressão da saída da chaminé com exaustor operando | -100 Pa |
| Pressão atmosférica | 101325 Pa |
| Vazão de petróleo | 0,11574 m ³ /s |
| Temperatura inicial do petróleo | 563,15 K |
| Temperatura final do petróleo | 648,15 K |

Fonte: Petrobras 2017

Os dados da Tabela 3.5, juntamente com os dados dimensionais do forno, foram utilizados para determinar as condições de contorno do problema da modelagem do equipamento.

3.6.3 Simplificações da geometria utilizada

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 quando 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 região de convecção teve seu comprimento aumentado de 5552 mm para 7400 mm a fim de garantir que não houvesse recirculação na região de saída dos gases. A Figura 3.5 mostra como o modelo fica após estas considerações.

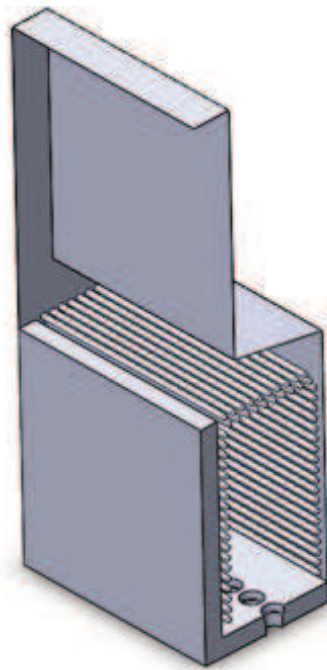


Figura 3.5: simplificação do modelo do forno

A última simplificação diz respeito aos queimadores do forno, pois sua complexidade aumentaria consideravelmente o tamanho da malha a ser criada de forma desnecessária. Para que toda a geometria do queimador não fizesse parte do modelo foi considerado que o combustível e o ar entrem na câmara de combustão a partir de um plano logo acima de cada queimador. O plano possui 6 entradas de gás e duas entradas de ar, as áreas destas entradas são

as mesmas da seção de entrada do queimador e a disposição também foi considerada a mesma (Figura 3.6).

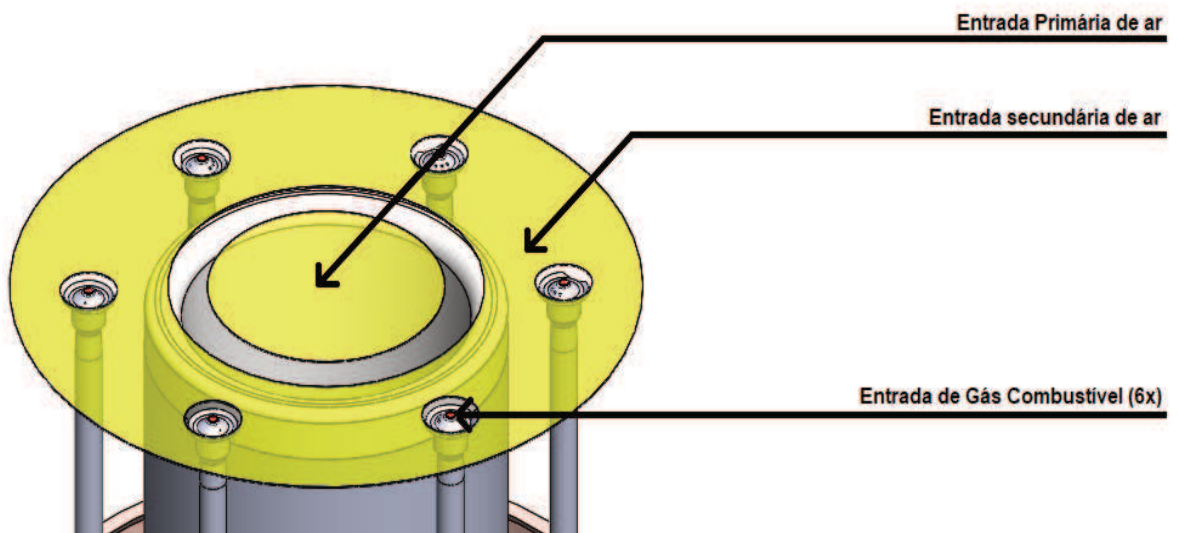


Figura 3.6: Simplificação dos queimadores

Com as simplificações adotadas, e utilizando um modelo que representa um quarto do forno, foram simulados 7,5 queimadores em linha.

3.6.4 Domínio computacional

As simplificações vistas neste capítulo delimitaram o volume de controle a um quarto das dimensões originais do equipamento, este é o domínio computacional utilizado nos cálculos da simulação numérica. Condições de contorno relativas às três dimensões do domínio computacional precisaram ser aplicadas a fim delimitar regiões onde ocorrem os processos de troca de calor e fluxo de massa. Assim o domínio computacional foi dividido nas regiões vistas a seguir:

- Paredes refratárias: a Figura 3.7 mostra as paredes do forno, esta região foi considerada como sem deslizamento e impermeáveis

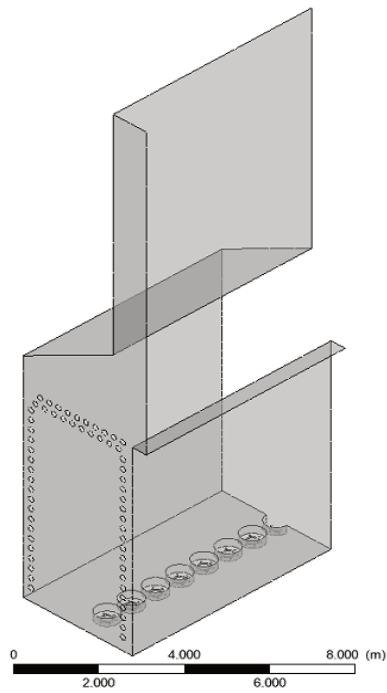


Figura 3.7: Paredes refratárias

- Simetrias: as simetrias utilizadas no equipamento permitiram a redução do domínio computacional a um quarto do equipamento real, estas podem ser verificadas na Figura 3.8.

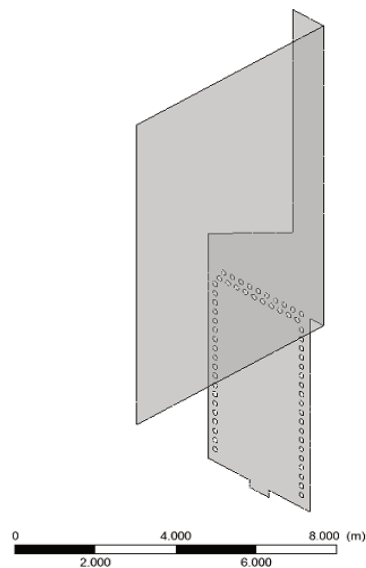


Figura 3.8: Perfis de simetria do forno

- Entradas: as regiões de entrada do forno estão localizadas na base do equipamento, o modelo comportou 7,5 queimadores com as devidas entradas primárias e secundárias de ar e também 6 entradas de gás combustível por queimador, como já fora mencionado no capítulo anterior. Como o modelo utiliza um quarto dos queimadores do forno real, as vazões de ar e gás combustível também precisaram ser reduzidas a um quarto das vazões originais. As distribuições das entradas da base do forno podem ser verificadas na Figura 3.9.

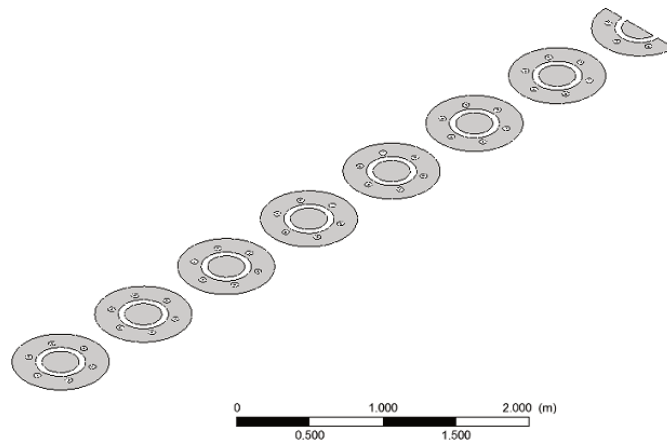


Figura 3.9: Entradas de ar e combustível

- Saída: a região onde os gases de combustão deixam o domínio computacional fica no ponto mais alto do modelo. Seu formato acompanha as paredes do forno, formando uma faixa no topo como mostra a Figura 3.10.

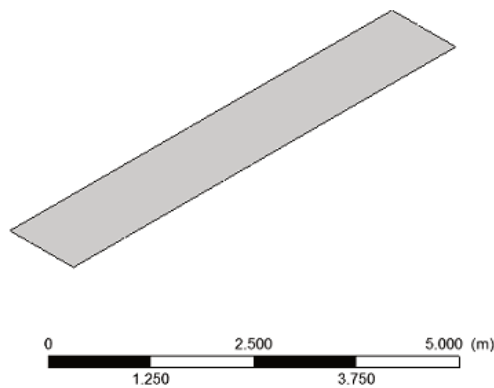


Figura 3.10: Saída do modelo

-Tubos: a região dos tubos é a região de maior interesse para este trabalho, principalmente a região exposta a chama na zona de radiação. O modelo desenvolvido possui 58 tubos, dos quais 48 são os de principal interesse para este trabalho, estes são divididos em dois passes, que neste trabalho são chamados de passe A e passe B e o fluido aquecido segue a de passes de baixo para cima conforme sua numeração, não estão numerados os 10 passes acima por não serem alvo do estudo. A Figura 3.11 (a) mostra as dimensões dos tubos do modelo desenvolvido, enquanto a Figura 3.11 (b) a nomenclatura utilizada para cada tubo.

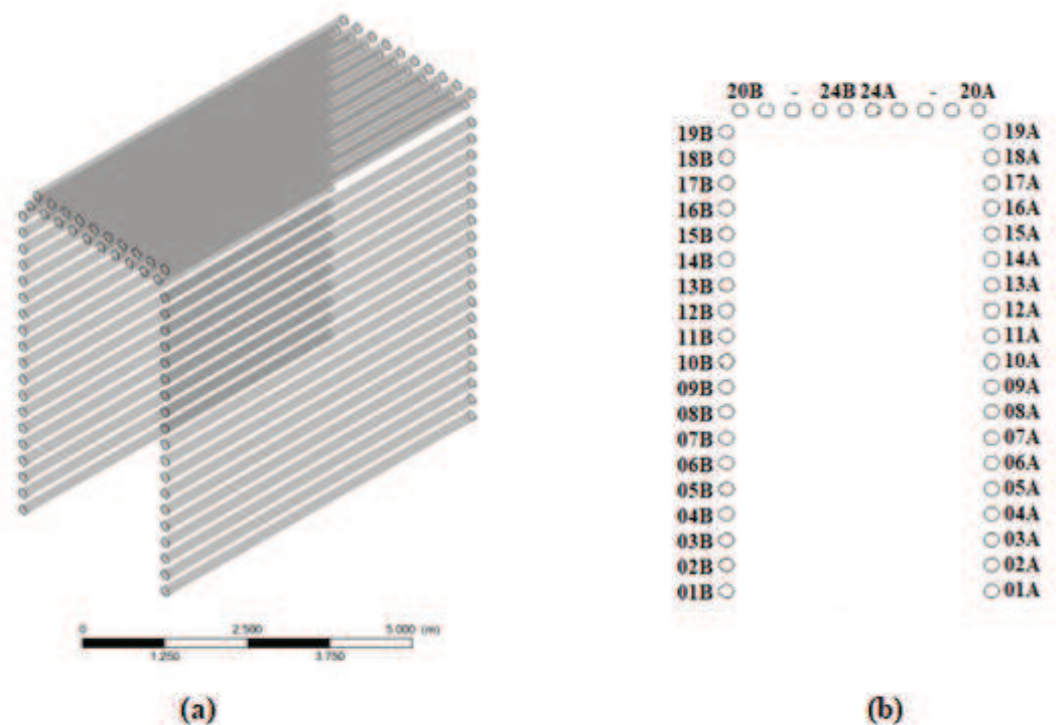


Figura 3.11: (a) Dimensões dos tubos do modelo; (b) nomenclatura utilizada por tubo.

3.6.5 Malhas desenvolvidas para o domínio computacional

As malhas desenvolvidas no trabalho, além de apresentarem as simplificações mencionadas acima, possuem regiões de maior refinamento em algumas 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.

As malhas criadas foram desenvolvidas no software Ansys ICEM CFD, do mesmo pacote do Ansys CFX 18.1. A proposta deste trabalho é implementar a simulação em três malhas com diferentes quantidades de células. A primeira malha desenvolvida que apresentou convergência nas simulações possui $2,67 \times 10^6$, a segunda $5,85 \times 10^6$ e a terceira possui $1,30 \times 10^7$ células. A Figura 3.12 mostra a malha com um quarto das dimensões do forno e também os tubos no seu interior.

Para as malhas desenvolvidas neste trabalho optou-se por preencher espaço tridimensional do domínio computacional com elementos que podem ter dois formatos distintos, hexaédricos ou prismáticos. Os elementos hexaédricos apresentam boa capacidade para economizar esforço computacional e melhor precisão nos resultados, pois as faces dos elementos são perpendiculares ao fluxo do fluido, ajudando a diminuir o erro (Ansys, 2015). Os elementos prismáticos apresentam maior eficiência para obter resultados nas regiões de limite do domínio computacional (Ansys, 2015), regiões com perfis circulares ou arredondados também apresentam uma maior resolução quando utilizado este tipo de elemento.

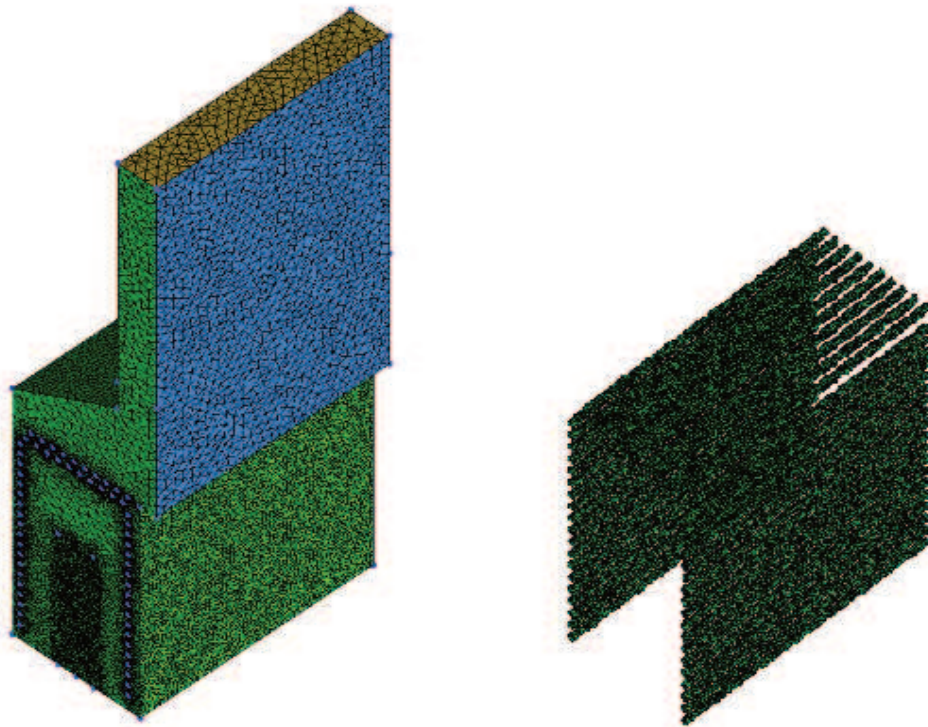


Figura 3.12: Malha do forno

3.6.6 Metodologia GCI para verificação da convergência de malhas

Uma das propostas deste trabalho é a de executar um teste de convergência de malha conforme a metodologia proposta por Celik et al. (2008). O teste de convergência de malha ou *GCI* (*Grid Convergence Index*) exige que três malhas refinadas sejam desenvolvidas para que a execução da metodologia seja eficaz. Assim a partir de uma malha com $2,67 \times 10^6$ células, foram desenvolvidas mais duas malhas uma intermediária com $5,85 \times 10^6$ células e outra mais refinada com $1,30 \times 10^7$ células.

Através do método GCI é possível avaliar o desvio entre resultados das simulações numéricas para as diferentes malhas com relação a um valor assintótico, que seria encontrado em uma malha com infinitas células. O estudo precisa ser executado em malhas com diferentes graus de refinamento, mas com células geometricamente semelhantes. O grau de refinamento de malha para estudo tridimensional é dado pela expressão

$$h = \left[\frac{1}{N} \sum_i^N (\Delta V_i) \right]^{1/3} \quad (3.30)$$

onde h é o tamanho representativo de malha, N é o número de células da malha e ΔV_i é o volume de cada célula i .

Segundo Celik et al. (2008), apesar do estudo poder ser executado com duas malhas, recomenda-se que seja executado com três, sendo

$$h_1 < h_2 < h_3 \quad (3.31)$$

Para este trabalho foi considerado que a razão entre as malhas segue um valor constante r de 1,3, que é o mínimo recomendado para o teste e, então,

$$r = \frac{h_2}{h_1} = \frac{h_3}{h_2} = 1,3 \quad (3.32)$$

sendo que esta razão r também é conhecida como grau de refinamento de malha. Os tamanhos representativos das malhas desenvolvidas e os seus respectivos números de volumes de controle podem ser verificados na Tabela 3.6.

Tabela 3.6: malhas desenvolvidas

| | Número de Volumes de Controle | Tamanho Representativo h (mm) |
|---------|----------------------------------|------------------------------------|
| Malha 1 | $1,30 \times 10^7$ | 26,8 |
| Malha 2 | $5,85 \times 10^6$ | 35,0 |
| Malha 3 | $2,67 \times 10^6$ | 45,5 |

Fonte: autores

A partir de três soluções numéricas diferentes, obtidas de três malhas diferentes é calculada a ordem aparente p . Para um grau de refinamento de malha constante entre as três malhas avaliadas, tem-se (De Vahl Davis, 1983)

$$p = \frac{\ln(|\varepsilon_{23}/\varepsilon_{12}|)}{\ln(r)} \quad (3.33)$$

sendo

$$\varepsilon_{12} = f_1 - f_2 \quad (3.34)$$

e

$$\varepsilon_{23} = f_2 - f_3 \quad (3.35)$$

onde f_1 é a solução para a malha mais refinada, f_2 a solução para a malha intermediária e f_3 para a malha menos refinada, sendo que os erros relativos entre uma malha mais refinada e outra menos refinada podem ser descritos como

$$e_{12} = \left| \frac{\varepsilon_{12}}{f_1} \right| \quad (3.36)$$

e

$$e_{23} = \left| \frac{\varepsilon_{23}}{f_2} \right| \quad (3.38)$$

A partir destes dados torna-se possível extrapolar o comportamento para uma malha com $h = 0$, ou seja, com infinitos volumes de controle. A extrapolação assintótica de uma solução, baseadas nas malhas mais refinadas, pode ser obtida com

$$f_{ext\ 12} = \frac{r^p f_1 - f_2}{r^p - 1} \quad (3.39)$$

e da mesma forma para as menos refinadas

$$f_{ext\ 23} = \frac{r^p f_2 - f_3}{r^p - 1} \quad (3.40)$$

e os erros relativos às malhas mais refinadas, analogamente às Eq. (7) e (8), são dados por

$$e_{ext\ 12} = \left| \frac{f_{ext\ 12} - f_1}{f_{ext\ 12}} \right| \quad (3.41)$$

e

$$e_{ext\ 23} = \left| \frac{f_{ext\ 23} - f_2}{f_{ext\ 23}} \right| \quad (3.42)$$

A extrapolação de resultados é interessante para a verificação do quanto os valores encontrados para cada variável da modelagem pode variar em função do refinamento de malha. Entretanto a grande quantidade de variáveis e pontos torna este tipo de análise um trabalho muito grande e talvez desnecessário. Com o índice GCI, que dá nome ao método, é possível a verificação do percentual relativo às incertezas numéricas encontradas em cada malha para cada variável de interesse.

Os autores verificados não citam um valor aceitável para o GCI pois seu resultado depende de fatores como a natureza do problema estudado, precisão desejada e disponibilidade de recursos computacionais.

O índice de convergência de malha GCI para as duas malhas mais refinadas, sendo para a mais refinada a malha 1, então pode ser verificado como

$$GCI_{12} = \frac{F_s |e_{12}|}{(r^p - 1)} \quad (3.43)$$

onde F_s é o fator de segurança com valor 1,25 para o caso com três malhas. Analogamente é possível determinar para a malha 2 o índice CGI dado por

$$GCI_{23} = \frac{F_s |\varepsilon_{23}|}{(r^p - 1)} \quad (3.44)$$

A partir dos índices de convergência GCI_{12} e GCI_{23} é possível calcular verificar a convergência da solução para a faixa assintótica pela relação:

$$\chi = \frac{GCI_{23}}{r^p GCI_{12}} \quad (3.45)$$

onde é desejável que χ seja mais próximo de 1, para que a solução fique mais próxima da faixa assintótica de convergência. Contudo, conforme Celik et al. (2008), para ε_{12} ou ε_{23} próximos a zero o método pode não vir a funcionar.

3.7 CONDIÇÕES DE CONTORNO

As condições de contorno utilizadas para o equipamento foram baseadas na operação do equipamento real, considerando-se nesta fase do trabalho apenas o metano como combustível. O oxidante é o ar seco pré-aquecido, com um excesso de ar de 15%, conforme API STD 560. A modelagem proposta utiliza o modelo de gás ideal, considerando-se as paredes do forno como sem deslizamento e impermeáveis. Na evolução do trabalho será implementada uma condição de contorno de convecção sobre estas superfícies. Somados aos dados operacionais, para a modelagem da radiação foram consideradas as emissividades da superfície internas do forno como 0,65 e dos tubos como 0,85 como já fora utilizado nas simulações de fornos industriais por Arrieta, Cadavid e Amell (2011).

3.7.1 Determinação das condições de contorno dos tubos do forno utilizando software HTRI Xfh 6.0

A transferência de calor nos tubos do forno depende de uma série de fatores como a temperatura do petróleo na entrada dos tubos, 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. Pode-se ainda considerar que o petróleo no interior do forno sofre vaporização parcial e o escoamento em algumas regiões da serpentina de petróleo precisaria ser considerado como bifásico. No entanto, devido à complexidade do problema, esta solução tornaria o custo computacional proibitivo. Em função disto, Dias e Castro (2011) criaram condições de contorno para os tubos dos fornos baseados na utilização de um software comercial específico baseado em método das zonas. Este método faz uma boa aproximação da troca térmica da serpentina a partir de caracterização do petróleo como um fluido formado por pseudo-componentes.

A proposta deste trabalho é utilizar a mesma técnica com o software comercial HTRI Xfh, que utiliza o método das zonas e caracterização do petróleo em pseudo-componentes, além de também utilizar a norma API STD 530 para determinar as condições termodinâmicas que ocorrem no interior da câmara de combustão como a temperatura dos tubos e coeficientes de troca de calor. Os dados que o software utiliza são os mesmos vistos na Tabela 3.1.

Os métodos utilizados nas simulações com o HTRI são oriundos de equações empíricas baseadas em extensos dados coletados ao longo de 40 anos de pesquisa na área de indústria. Jethva e Bhagchandani (2013), em seu trabalho compararam os resultados dos cálculos do software com o modelo clássico, proposto por Lobo e Evans (1939) com os resultados do HTRI Xfh, dentre os resultados encontrados o HTRI Xfh calculou um fluxo de calor 11% maior do que o modelo clássico para o mesmo combustível.

O software permite simular o comportamento do fluido de processo e gases de combustão no interior do forno de maneira a obter um valor aproximado para os perfis de temperatura dos tubos. A dificuldade em utilizar este tipo de software está nas limitações para as configurações do equipamento a ser estudado, como número de queimadores ou formato da câmara de combustão, a Figura 3.13 mostra a configuração para as condições geométricas utilizadas.

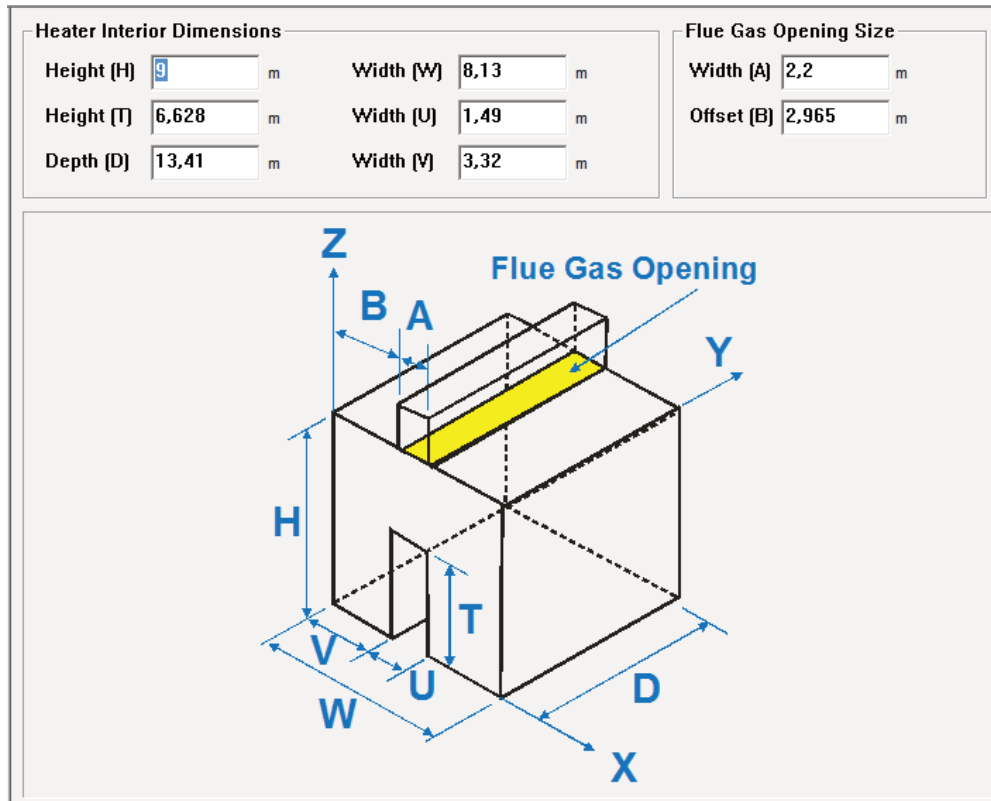


Figura 3.13: Configuração da geometria da câmara de combustão pelo software HTRI Xfh.

Embora algumas configurações sejam limitadas, a grande quantidade de dados e equações empíricas permitem ao software encontrar rapidamente a solução para o problema do forno. O software é amplamente utilizado na indústria para simulações e melhoramentos na operação de fornos industriais como visto no trabalho de Oakley (2017) utilizando a versão mais atual do software verificou ser possível o aumento da taxa de aquecimento de petróleo com em 20% mantendo as condições operacionais do equipamento dentro dos limites operacionais.

Para este trabalho que os devidos cálculos do software HTRI Xfh fossem executados de maneira correta foram consideradas as condições operacionais do forno já descritas na Tabela 3.5 e também foi preciso de dados do grau API e da curva do ponto de vaporização do petróleo.

3.7.2 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 foram utilizados 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. A Figura 3.14 mostra a curva TBP para este petróleo retirada da base de dados on line da TOTSA.

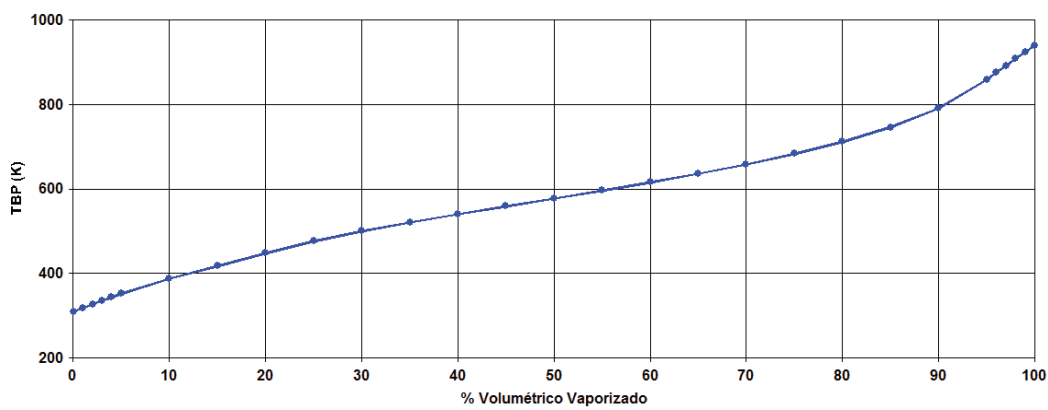


Figura 3.14: Curva TBP estimada para Petróleo Nigeriano “Bonga”

3.7.3 Condições de contorno calculadas pelo software HTRI Xfh 6.0

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. O fluxograma mostrado na Figura 3.15 mostra um fluxograma com as entradas necessárias ao funcionamento do software HTRI Xfh e os resultados de sua simulação.

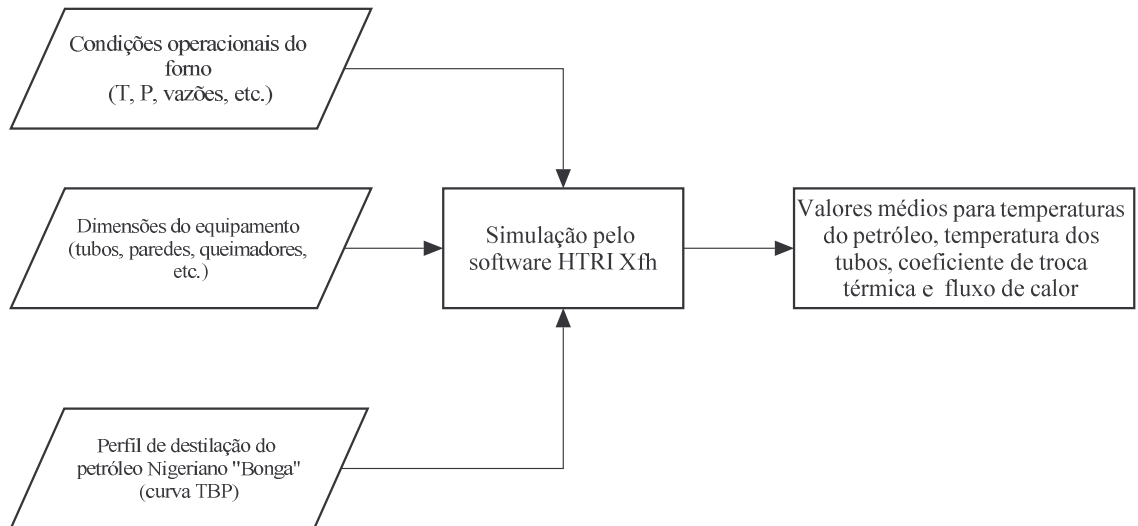


Figura 3.15: Fluxograma da utilização do software HTRI Xfh.

A simulação do processo de combustão permitiu a obtenção do fluxo de calor médio aos tubos do forno em W/m^2 , temperatura do fluido aquecido no interior de cada tubo, temperatura média de superfícies dos tubos e o coeficiente de troca de calor no interior dos tubos. Os valores dos coeficientes de troca térmica e temperatura do fluido para cada tubo podem ser vistos na Tabela 3.7.

Tabela 3.7: Dados para as condições de contorno dos tubos do forno

| Tubo | T_{Fluido} (K) | h ($Wm^{-2}K^{-1}$) | Tubo | T_{Fluido} (K) | h ($Wm^{-2}K^{-1}$) |
|------|------------------|-------------------------|------|------------------|-------------------------|
| 1A | 575,4 | 345 | 1B | 574,5 | 346 |
| 2A | 580,2 | 354 | 2B | 581,2 | 349 |
| 3A | 585,7 | 356 | 3B | 586,3 | 342 |
| 4A | 589,8 | 352 | 4B | 590,1 | 349 |
| 5A | 594,1 | 363 | 5B | 595,5 | 355 |
| 6A | 599,2 | 366 | 6B | 600,1 | 353 |
| 7A | 604,2 | 371 | 7B | 606,8 | 356 |
| 8A | 608,4 | 362 | 8B | 611,5 | 357 |
| 9A | 611,5 | 369 | 9B | 615,6 | 364 |
| 10A | 616,3 | 373 | 10B | 620,3 | 354 |
| 11A | 617,9 | 375 | 11B | 625,2 | 356 |
| 12A | 625,1 | 379 | 12B | 630,4 | 359 |
| 13A | 628,3 | 375 | 13B | 634,2 | 368 |

| | | | | | |
|-----|-------|-----|-----|-------|-----|
| 14A | 632,8 | 384 | 14B | 637,7 | 373 |
| 15A | 635,4 | 395 | 15B | 643,6 | 389 |
| 16A | 637,6 | 413 | 16B | 645,2 | 395 |
| 17A | 641,7 | 407 | 17B | 649,3 | 401 |
| 18A | 642,6 | 402 | 18B | 652,8 | 402 |
| 19A | 644,1 | 396 | 19B | 655,9 | 420 |
| 20A | 646,6 | 405 | 20B | 657,1 | 430 |
| 21A | 647,3 | 410 | 21B | 657,5 | 430 |
| 22A | 648,8 | 402 | 22B | 658,9 | 427 |
| 23A | 649,2 | 393 | 23B | 662,3 | 411 |
| 24A | 647,7 | 411 | 24B | 659,2 | 420 |

Fonte: autores

Estas condições de contorno foram aplicadas no Ansys CFX tratando os tubos como paredes com coeficiente de troca térmica. Neste caso, o fluxo de calor em um limite de parede do tubo é implicitamente especificado usando um coeficiente interno de transferência de calor, h , e uma temperatura interna, T_o que no modelo foi considerada a mesma do fluido. Esta condição de contorno pode ser usada para modelar a resistência térmica fora do domínio computacional, como no diagrama abaixo na Figura 3.16:

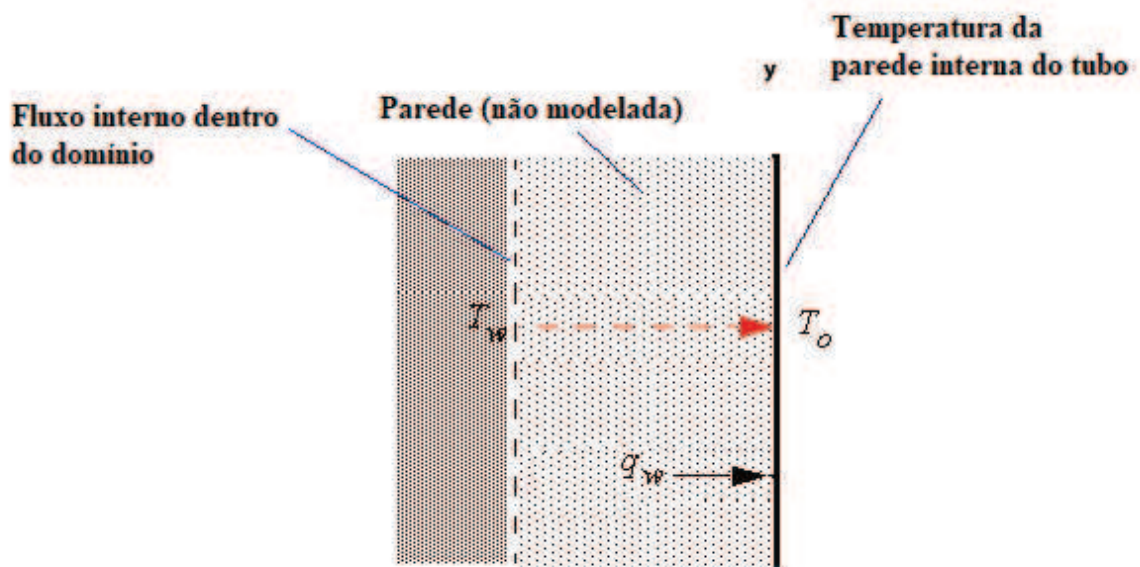


Figura 3.16: Diagrama de transferência de calor utilizado pelo Ansys CFX.

Sendo T_w a temperatura na superfície do tubo e q_w'' o fluxo de calor por metro quadrado de tubo dado por

$$q_w'' = h(T_w - T_o) \quad (3.1)$$

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 de pseudo-componentes conforme a sua análise. No entanto, 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 as utilizadas neste trabalho. A adição de um modelo de escoamento nos tubos além de não ser necessário à simulação aumentaria consideravelmente o esforço computacional, provavelmente inviabilizando o modelo.

3.7.4 Condições de contorno aplicadas ao modelo desenvolvido no software Ansys CFX 18.1

As condições de contorno utilizadas na simulação foram adaptadas à operação de um quarto do forno, os dados de pressão e vazões de ar e combustível são os mesmos usados em operação normal. A Tabela 3.8 apresenta todas as condições de contorno adotadas neste estudo.

Tabela 3.8: Condições de contorno da modelagem

| Fronteira/ superfície | Tipo de condição de contorno | Valor |
|------------------------|------------------------------|---|
| Entrada de combustível | Entrada | Vazão: 0,3 kg/s |
| | | Composição (massa): 100% CH ₄ |
| | | Temperatura: 300,15 K |
| Entrada de ar primária | Entrada | Vazão: 1,2 kg/s |
| | | Composição (massa): 23,2% O ₂ + 76,8% N ₂ |
| | | Temperatura: 543,15 K |
| | Entrada | Vazão: 4,6 kg/s |

| | | |
|--------------------------|----------|--|
| Entrada de ar secundária | | Composição (massa): 23,2% O ₂ + 76,8% N ₂ |
| Saída | Saída | Temperatura: 543,1 5K |
| Parede interna | Parede | Pressão: -100 Pa |
| Tubos | Parede | Sem deslizamento e impermeável |
| Simetria 1 | Simetria | Emissividade 0,60 |
| Simetria 2 | Simetria | T e h da Tabela 3.6 |
| | | Emissividade: 0,85 |
| | | - |
| | | - |

Fonte: autores

As vazões de ar e combustível utilizados neste trabalho para o forno todo, operando com 30 queimadores foram apresentadas na Tabela 3.5.

4 VALIDAÇÃO DA MODELAGEM

Embora a geometria complexa e grandes dimensões dos fornos industriais influenciem diretamente no processo de escoamento no interior de suas câmaras, estes fatores não são os responsáveis pelo processo de combustão. Os processos de combustão apresentam uma interdependência entre os mecanismos que governam os fenômenos da cinética química, escoamento e transferência de calor. É justamente a complexidade desta interdependência que dificulta a compreensão do fenômeno da combustão como um todo havendo muitas vezes a necessidade de utilização de modelos para prever os resultados que seriam obtidos em experimentos práticos.

No que diz respeito ao desenvolvimento de um modelo numérico que seja capaz de representar adequadamente o comportamento dos fenômenos ligados à combustão, já foi visto neste trabalho que uma abordagem amplamente utilizada é a formulação matemática das equações fundamentais de conservação de massa, quantidade de movimento, energia e espécies químicas em conjunto com a utilização de modelos de turbulência, modelos de reações químicas e modelos de transferência de calor e radiação. Uma vez definida a modelagem para a combustão as características do problema a ser estudado podem ser inseridas como condições de contorno e parâmetros da solução. Os resultados por fim devem ser comparados com os verificados em um experimento sob as mesmas condições simuladas no modelo, ou ainda com outros casos já conhecidos, obtendo-se assim uma constatação quando a verificação e validação da solução.

O experimento prático exige com os equipamentos utilizados estejam sob boas condições e devidamente calibrados para que os resultados obtidos tenham a devida acurácia. Este tipo de validação experimental por vezes não pode ser executada de maneira confiável em equipamentos industriais de grandes dimensões, como os fornos estudados neste trabalho, pois os mesmos não operam em ambientes controlados e seus regimes de operação ininterrupta não permitem com que hajam rotinas para calibrações dos instrumentos em curtos períodos de tempo.

Assim sendo, buscando uma maneira para validar os modelos empregados na simulação dos fornos estudados neste trabalho utilizou-se a simulação de uma câmara de combustão utilizando gás natural apresentada no trabalho de Silva et al. (2013), que realiza a aplicação da mesma modelagem implementada no presente trabalho para avaliar a queima numa câmara de combustão de testes apresentada por Garréton e Simonin (1994). A geometria deste trabalho,

dados de operação da câmara de combustão e resultados experimentais já foram amplamente exploradas na literatura e estão disponíveis em vários trabalhos (Nieckele et al., 2002; Silva et al. 2007, Centeno et al., 2014).

No trabalho de Silva et al. (2013) apresentou-se a simulação numérica tridimensional da combustão de gás natural com ar atmosférico dentro de uma câmara cilíndrica visando verificar o efeito do empuxo devidas às variações de densidade provocadas pela elevação de temperaturas nos gases de combustão. Em sua análise foram comparados os resultados obtidos nas simulações de combustão com e sem efeito das forças de empuxo com os dados experimentais publicados por Garréton e Simonin (1994).

O trabalho fora modelado para calcular a temperatura no interior da câmara de combustão bem como concentrações de espécies químicas. Foram resolvidas pelo Ansys CFX as equações de conservação de massa, quantidade de movimento, de energia e espécies químicas. Os modelos utilizados no trabalho foram $k-\varepsilon$ padrão para a turbulência, o WD2 para representar a oxidação do metano pelo ar atmosférico em duas etapas globais, o modelo combinado de *Eddy Break-Up* - Arrhenius para cálculo das taxas de reação e o modelo DTRM – *Discrete Transfer Radiation Model* para prever a transferência de calor por radiação. Para representar espectro de absorção dos gases de combustão foi utilizado o modelo WSGG – *Weighted Sum of Gray Gases* com coeficientes de Dorigon (Dorigon et al., 2013). O processo de combustão foi analisado no regime estacionário.

A geometria utilizada neste estudo é baseada na câmara horizontal cilíndrica que de comprimento igual a 1,70 m e diâmetro de 0,50 m. Uma vista axi-simétrica da geometria pode ser verificada na Figura 4.1.

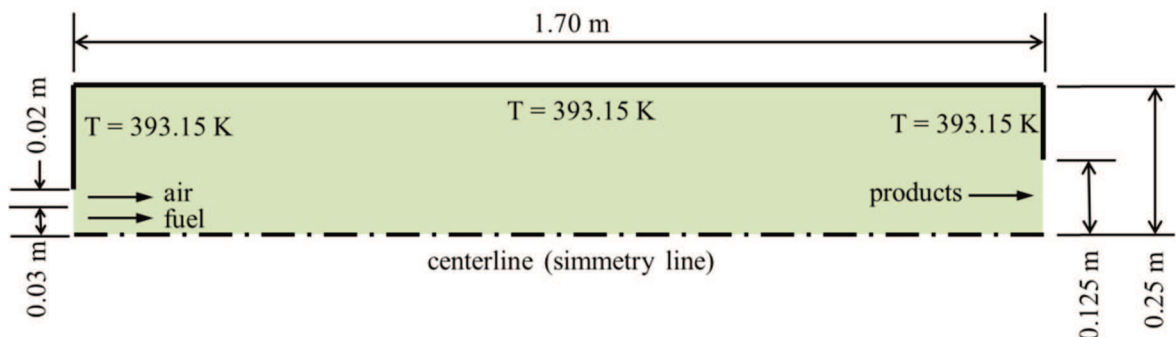


Figura 4.1 – Geometria do combustor (Centeno et al., 2014)

A discretização foi feita com o software Ansys ICEM CFD, e a malha construída apresentou aproximadamente $2,15 \times 10^6$ elementos de tamanhos desiguais após realização de

testes de qualidade de malha, usando refinamentos de malha na região reativa, junto da entrada de combustível. A Figura 4.2 mostra a vista frontal (a) e lateral (b) da malha.



Figura 4.2 - (a) Vista frontal da malha; (b) vista lateral da malha (Silva et al., 2013).

O combustível entra na câmara através de um duto cilíndrico com diâmetro de 0,06 m, enquanto o ar entra na câmara através de um duto anular concêntrico com um espaçamento de 0,02 m. O ar de entrada é composto em base mássica por oxigênio 23%, 76% de nitrogênio e 1% de vapor de água, enquanto o combustível é composto por 90% de metano e 10% de nitrogênio. A simulação utilizou uma taxa de vazão de massa de combustível de 0,01453 kg/s a uma temperatura de 313,15 K, uma vazão de massa de ar de 0,1988 kg/s, a uma temperatura de 323,15 K. Foi assumido para as paredes da câmara emissividade de 0,6 e estas foram mantidas a uma temperatura de 393,15 K. Equipamentos como o soprador de ar e os outros componentes externos não estão incluídos no domínio computacional, embora seus efeitos tenham sido levados em conta através das condições de fluxo de entrada.

A Figura 4.3 mostra perfis de temperatura na câmara de combustão para a posição radial localizada a 1,312 m da entrada da câmara. Nesta região da chama, que corresponde à região próxima ao duto de saída da câmara, observam-se diferenças entre os resultados com e sem empuxo na ordem de 170 K, para praticamente toda a região. Quando comparados os resultados com os dados experimentais de Garréton e Simonin (1994) a diferença máxima verificada foi de 20% para o caso da simulação sem empuxo e 10% na simulação com empuxo. Verificou-se também que na região próxima à parede da câmara a simulação sem empuxo passou a apresentar diferenças da mesma ordem do que o caso das simulações com empuxo, quando comparados aos dados experimentais.

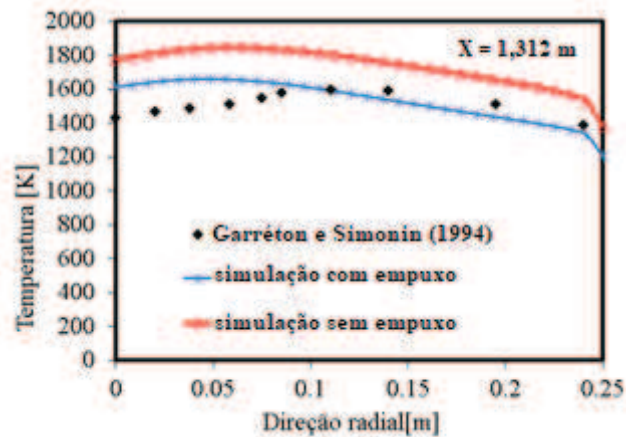


Figura 4.3: Perfil de temperatura na direção radial (1,312 m).

A Figura 4.4 mostra a temperatura que ao longo de toda a linha central da câmara cilíndrica. Nesta figura se verifica que o empuxo praticamente não interfere no resultado final das simulações e a máxima diferença encontrada quando comparados à Garréton e Simonin (1994) é da ordem de 20% para a região mais próxima ao duto de saída dos gases de combustão.

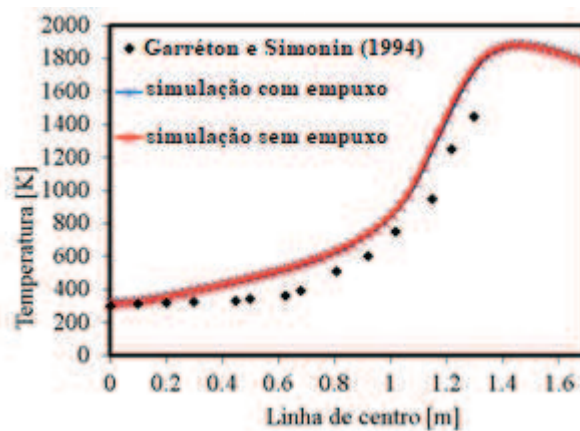


Figura 4.4: Perfil de temperatura sob a linha de centro.

A Figura 4.5 mostra sob a linha de simetria os perfis de frações mássicas de oxigênio em (a) e dióxido de carbono em (b). O modelo de combustão subestima as taxas de reações químicas e o consumo de oxigênio, que apresenta maiores frações de massa. Para a região próxima à cerca de metade do comprimento axial os resultados estão em melhor acordo quando comparados aos dados experimentais para todos os casos. Além disso, pode-se ver que o efeito do empuxo foi praticamente nulo e não alterou os resultados numéricos sobre a linha de simetria da câmara.

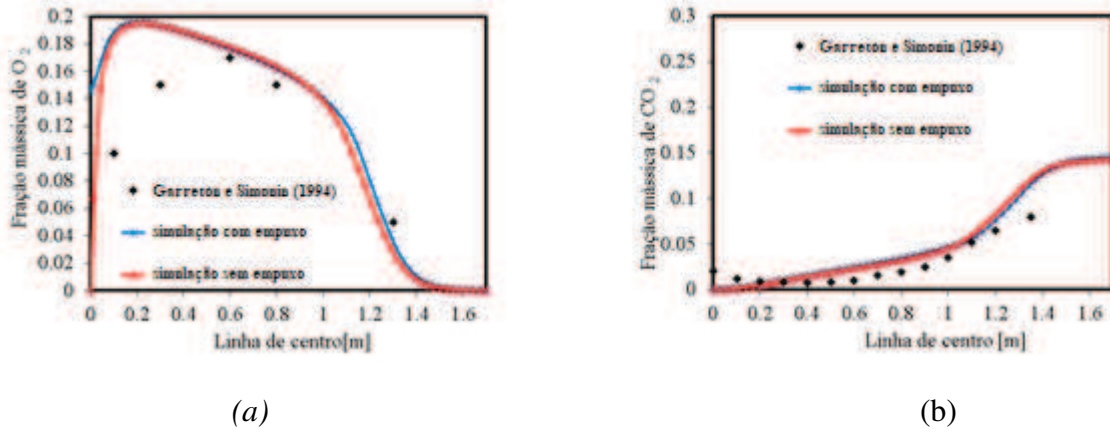


Figura 4.5: (a) Fração mássica de O_2 ; (b) Fração mássica de CO_2 .

4.1 REPETITIVIDADE DO MODELO

O modelo de combustão apresentou resultados satisfatórios para o caso simulando a geometria apresentada por Garréton e Simonin (1994). Apesar da diferença máxima de temperatura da chama da ordem de 20% quando comparado aos dados experimentais verificou-se que os perfis de temperatura obtidos acompanharam as tendências dos dados experimentais e os efeitos do empuxo devido a variação de massa específica não geram diferenças significativas entre os resultados de maneira geral.

As concentrações de oxigênio e dióxido de carbono apresentaram bons resultados principalmente nas regiões de maiores temperaturas de chama e o empuxo também pouco afeta os resultados, apesar de discordarem mais significativamente em relação aos dados experimentais. Entretanto, de forma geral, observando a complexidade do problema e as simplificações impostas nos diferentes modelos utilizados para representar os fenômenos presentes na combustão, pode-se verificar que os resultados obtidos com a modelagem aplicada no presente trabalho têm a capacidade para representar de forma satisfatória a física envolvida.

Em vista dos resultados encontrados é esperado que, para as mesmas configurações do modelo de combustão, a simulação dos fornos avaliados no presente trabalho apresente erros máximos da mesma ordem de grandeza, semelhantes aos resultados verificados na simulação da câmara de combustão de Garréton e Simonin (1994) e apresentados por Silva et al. (2013), erros estes aceitáveis para o problema em questão.

5 AVALIAÇÃO DA QUALIDADE DA MALHA

Simulações numéricas computacionais exigem uma análise cuidadosa da malha computacional a ser utilizada para a representação do domínio físico em estudo, de forma a garantir que ela represente da forma mais fiel possível o problema. Esta análise depende do conhecimento e da experiência do responsável pela simulação, e existem métodos para se validar uma malha, verificando-se a consistência física da modelagem e também a interferência da malha sobre os resultados, garantindo maior precisão nos resultados obtidos.

O teste de qualidade de malha e o GCI – *Grid Convergence Index*, ou Índice de Convergência de Malha são alguns destes métodos de verificação da qualidade de malha computacional, que visam garantir a escolha correta da malha avaliando-se a precisão dos resultados e o esforço computacional empregado, encontrando o equilíbrio entre ambos. O teste ou método baseia-se na extrapolação de Richardson, apresentada por Roache (1994) e atualizada por Celik et al. (2008). O método consiste em construir malhas mais e menos refinadas no entorno de uma malha pré-definida. Entende-se por refinamento a diminuição das dimensões dos volumes de controle empregados, ou seja, maior quantidade destes volumes aumentando o tamanho da malha. A análise é realizada sobre alguma variável previamente escolhida, e os resultados devem ser comparados entre si, escolhendo-se a malha que garanta resultados cada vez mais convergentes como função deste refinamento. Com esta finalidade, nesta seção apresenta-se então um estudo para verificação da qualidade da malha computacional a ser utilizada nas simulações computacionais da modelagem desenvolvida. Através de um estudo comparativo entre diferentes tamanhos de malha faz-se uma avaliação comparativa entre alguns dos principais resultados a fim de verificar a qualidade da malha sobre os resultados, bem como a aplicação do teste GCI.

A Figura 5.1 exemplifica como perfil de temperaturas na superfície dos tubos difere quando se comparam as malhas desenvolvidas na simulação do forno avaliado neste trabalho. Foram comparadas as temperaturas calculadas nas posições dos os termopares existentes equipamento real. Estão representados apenas os termopares do Passe B (tubos 3B, 5B, 12B e 24B) apenas no intuito de demonstrar a existência de diferença dos resultados decorrentes da malha utilizada para simulação, análises e comparações dos resultados simulados com o equipamento real serão vistos no Capítulo 6. Os resultados apresentados neste gráfico dizem respeito a três diferentes malhas concebidas para o mesmo domínio computacional seguindo os critérios apresentados acima. Os resultados destas simulações em CFD nas regiões dos termopares são variáveis que podem ser verificadas pelo histórico do equipamento. No entanto,

este tipo de análise precisa ser atrelada às condições operacionais conhecidas, ou seja, com resultados conhecidos. Eventualmente o estudo em CFD pode também ser utilizado para testar condições nas quais não haja dados experimentais e, por esta, razão faz-se necessário obter a confiabilidade nos resultados destas simulações.

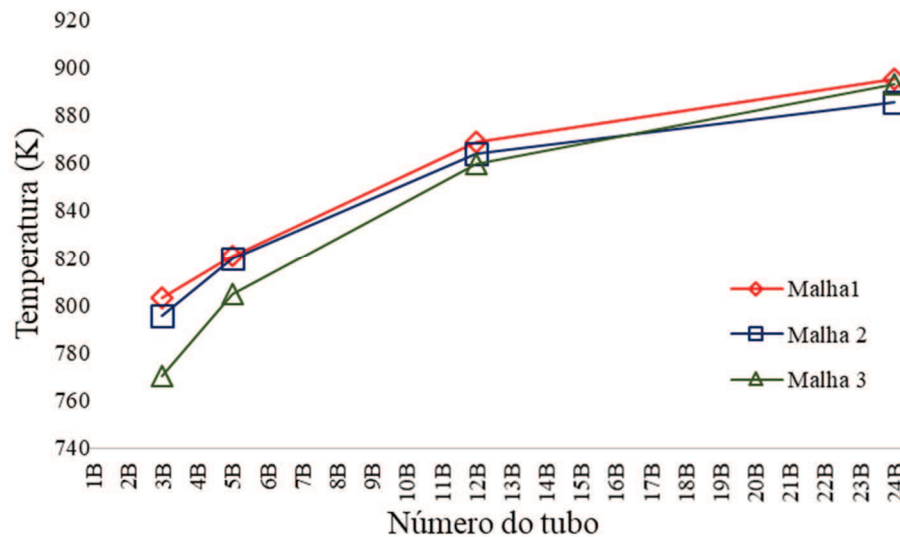


Figura 5.1: Simulação da temperatura na posição dos termopares do passe B do Forno estudado

O número de elementos utilizados em cada malha no estudo estão disponíveis na Tabela 5.1.

Tabela 5.1: Número de elemento por malha

| | Número de elementos |
|---------|---------------------|
| Malha 1 | $1,30 \times 10^7$ |
| Malha 2 | $5,85 \times 10^6$ |
| Malha 3 | $2,67 \times 10^6$ |

Fonte: autores

Observando os perfis de temperaturas da Figura 5.1 verifica-se que as três malhas avaliadas, cujos resultados diferem em certo grau entre si, parecem estar dentro da mesma ordem de grandeza e, por essa razão, é necessária uma análise destes dados obtidos a fim de verificar se discretização aplicada ao domínio físico apresenta resultados suficientemente

satisfatórios independentemente do grau de refinamento da malha. Assim, com o objetivo de verificar o nível de independência da solução numérica do problema do forno com a qualidade da malha computacional foi realizado também um teste de convergência segundo a abordagem GCI.

Os cálculos necessários ao método GCI foram aplicados tendo como variáveis de estudo as temperaturas dos tubos do forno estudado no plano onde estão localizados os termopares do equipamento por ser uma das regiões de maior interesse neste trabalho. O plano está localizado como mostra a Figura 5.2.

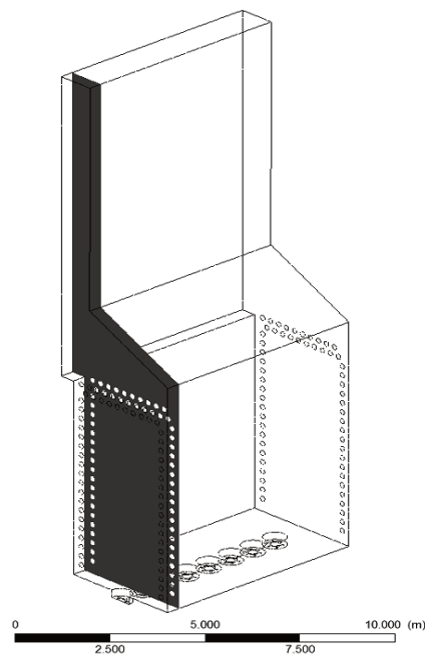


Figura 5.2: Plano de corte onde se localizam os termopares do forno

Sob o plano de corte foram consideradas para cada malha as regiões das superfícies dos tubos que estão expostas diretamente à chama do forno. A Tabela 5.2 mostra os resultados para as temperaturas encontradas na região selecionada para cada uma das malhas desenvolvidas, sendo a Malha 1 a mais refinada, a Malha 2 intermediária e a Malha 3 a mais grosseira.

Tabela 5.2: Temperaturas dos tubos na região selecionada calculadas pelo Ansys CFX para as malhas utilizadas

| Número do tubo | Malha 1 T (K) | Malha 2 T (K) | Malha 3 T (K) | Número do tubo | Malha 1 T (K) | Malha 2 T (K) | Malha 3 T (K) |
|----------------|------------------|------------------|------------------|----------------|------------------|------------------|------------------|
| 1A | 757,84 | 755,09 | 712,92 | 1B | 751,00 | 749,26 | 747,96 |

| | | | | | | | |
|-----|--------|--------|--------|-----|--------|--------|--------|
| 2A | 773,72 | 761,53 | 727,8 | 2B | 775,86 | 760,91 | 758,31 |
| 3A | 745,77 | 776,23 | 765,21 | 3B | 802,96 | 795,52 | 770,47 |
| 4A | 801,96 | 797,43 | 781 | 4B | 819,8 | 813,23 | 802,2 |
| 5A | 811,95 | 803,20 | 748,11 | 5B | 820,91 | 819,76 | 804,71 |
| 6A | 811,75 | 816,02 | 790,07 | 6B | 835,31 | 829,79 | 827,2 |
| 7A | 823,02 | 822,73 | 770,66 | 7B | 833,04 | 831,00 | 821,1 |
| 8A | 830,89 | 827,57 | 796,68 | 8B | 852,33 | 839,33 | 809,74 |
| 9A | 828,69 | 825,97 | 790,09 | 9B | 854,71 | 847,45 | 842,09 |
| 10A | 830,9 | 834,30 | 804,62 | 10B | 864,26 | 855,46 | 856,62 |
| 11A | 831,89 | 811,32 | 820 | 11B | 861,42 | 860,98 | 861,61 |
| 12A | 807,03 | 806,21 | 806,14 | 12B | 868,46 | 864,78 | 859,4 |
| 13A | 832,6 | 832,02 | 811,51 | 13B | 860,85 | 853,42 | 853,72 |
| 14A | 824,35 | 822,20 | 817,31 | 14B | 854,59 | 851,26 | 845,69 |
| 15A | 824,11 | 816,67 | 812,43 | 15B | 843,48 | 844,24 | 833,48 |
| 16A | 820,04 | 819,00 | 812,3 | 16B | 837,82 | 830,85 | 836,07 |
| 17A | 830,05 | 829,26 | 792,08 | 17B | 817,52 | 833,81 | 841,97 |
| 18A | 831,25 | 831,19 | 817,49 | 18B | 835,26 | 829,35 | 841,2 |
| 19A | 834,08 | 833,00 | 812,52 | 19B | 823,54 | 825,12 | 823,95 |
| 20A | 832 | 829,62 | 814,46 | 20B | 824,25 | 819,78 | 829,04 |
| 21A | 853,94 | 851,58 | 842,68 | 21B | 849,41 | 848,81 | 853,42 |
| 22A | 875,89 | 863,00 | 861 | 22B | 868,79 | 867,65 | 863,13 |
| 23A | 890,96 | 886,03 | 856,64 | 23B | 890,5 | 888,90 | 897,51 |
| 24A | 887,73 | 885,14 | 887,73 | 24B | 895,07 | 888,79 | 893,12 |

Fonte: autores

Os erros relativos entre os resultados encontrados para as temperaturas nestas regiões para cada tubo dos passes A e B podem ser verificados em formato percentual na Tabela 5.3.

Tabela 5.1: Erros relativos entre soluções para a temperatura dos tubos sob o plano selecionado

| Número do tubo | e_{12} (%) | e_{23} (%) | Número do tubo | e_{12} (%) | e_{23} (%) |
|----------------|--------------|--------------|----------------|--------------|--------------|
| 1A | 0,36 | 5,58 | 1B | 0,23 | 0,17 |
| 2A | 1,58 | 4,42 | 2B | 1,93 | 0,34 |

| | | | | | |
|-----|------|------|-----|-------|------|
| 3A | 4,08 | 1,42 | 3B | 0,93 | 3,15 |
| 4A | 0,56 | 2,06 | 4B | 0,80 | 1,36 |
| 5A | 1,08 | 6,86 | 5B | 0,14 | 1,84 |
| 6A | 0,53 | 3,18 | 6B | 0,66 | 0,31 |
| 7A | 0,03 | 6,33 | 7B | 0,245 | 1,19 |
| 8A | 0,40 | 3,73 | 8B | 1,52 | 3,52 |
| 9A | 0,33 | 4,34 | 9B | 0,85 | 0,63 |
| 10A | 0,41 | 3,56 | 10B | 1,02 | 0,13 |
| 11A | 2,47 | 1,07 | 11B | 0,05 | 0,07 |
| 12A | 0,10 | 0,01 | 12B | 0,42 | 0,62 |
| 13A | 0,07 | 2,46 | 13B | 0,86 | 0,03 |
| 14A | 0,26 | 0,59 | 14B | 0,39 | 0,65 |
| 15A | 0,90 | 0,52 | 15B | 0,09 | 1,27 |
| 16A | 0,13 | 0,81 | 16B | 0,83 | 0,63 |
| 17A | 0,09 | 4,48 | 17B | 1,99 | 0,98 |
| 18A | 0,01 | 1,65 | 18B | 0,71 | 1,43 |
| 19A | 0,13 | 2,46 | 19B | 0,19 | 0,14 |
| 20A | 0,28 | 1,83 | 20B | 0,54 | 1,13 |
| 21A | 0,28 | 1,04 | 21B | 0,07 | 0,54 |
| 22A | 1,47 | 0,23 | 22B | 0,13 | 0,52 |
| 23A | 0,55 | 3,32 | 23B | 0,18 | 0,97 |
| 24A | 0,29 | 0,44 | 24B | 0,70 | 0,49 |

Fonte: autores

O erro relativo entre malhas para as temperaturas calculadas para os tubos na região selecionada apresentou resultados satisfatórios em todos os casos, indicando que as malhas convergem para as mesmas soluções. A média de erro entre a malha mais refinada e a intermediária foi de 0,66% com erro máximo encontrado de 4,08%, enquanto que a média de erro entre a malha intermediária e a menos refinada foi de 1,76% com valor máximo de 6,86%.

Pelo método GCI buscou-se verificar a convergência dos resultados executando o cálculo de valores extrapolados. Os resultados dos valores assintóticos extrapolados e o índice GCI para cada temperatura estão disponíveis na Tabela 5.4. A variável f_{ext} diz respeito ao valor assintótico calculado levando em consideração os resultados das temperaturas na região selecionada em simulações com a malha mais refinada e a malha intermediária, a variável f_{ext}

$_{23}$ é relativa ao mesmo procedimento de cálculo levando em consideração os resultados para as malhas intermediária e a mais grosseira.

Tabela 5.4: Valores extrapolados assintóticos e índice GCI para os tubos na região analisada

| Número do tubo | $f_{ext 12}$ T (K) | GCI_{12} | $f_{ext 23}$ T (K) | GCI_{23} | Número do tubo | $f_{ext 12}$ T (K) | GCI_{12} | $f_{ext 23}$ T (K) | GCI_{23} |
|----------------|-------------------------|------------|-------------------------|------------|----------------|-------------------------|------------|-------------------------|------------|
| 1A | 758,03 | 0,03 | 758,02 | 0,48 | 1B | 744,15 | -1,14 | 744,12 | -0,86 |
| 2A | 780,62 | 1,11 | 780,61 | 3,13 | 2B | 757,77 | -2,91 | 757,71 | -0,52 |
| 3A | 793,48 | -7,99 | 758,97 | -2,78 | 3B | 806,09 | 0,49 | 806,09 | 1,66 |
| 4A | 803,68 | 0,27 | 803,63 | 0,98 | 4B | 829,48 | 1,48 | 829,41 | 2,50 |
| 5A | 813,61 | 0,25 | 813,59 | 1,62 | 5B | 821,09 | 0,01 | 821,01 | 0,19 |
| 6A | 810,91 | 0,13 | 821,12 | 0,78 | 6B | 824,91 | -1,56 | 824,75 | -0,74 |
| 7A | 823,02 | 0,01 | 823,00 | 0,04 | 7B | 833,57 | 0,08 | 833,42 | 0,38 |
| 8A | 831,29 | 0,06 | 831,28 | 0,56 | 8B | 862,59 | 1,49 | 862,51 | 3,45 |
| 9A | 828,91 | 0,03 | 828,91 | 0,44 | 9B | 827,08 | -4,04 | 827,01 | -3,00 |
| 10A | 830,47 | 0,06 | 838,12 | 0,57 | 10B | 854,13 | -1,46 | 856,79 | -0,19 |
| 11A | 796,33 | -5,34 | 826,33 | -2,31 | 11B | 862,42 | 0,14 | 859,54 | 0,21 |
| 12A | 806,14 | -0,14 | 806,01 | -0,01 | 12B | 876,44 | 1,14 | 876,36 | 1,68 |
| 13A | 832,61 | 0,01 | 832,53 | 0,09 | 13B | 853,11 | -1,12 | 853,74 | -0,04 |
| 14A | 826,04 | 0,26 | 826,03 | 0,58 | 14B | 859,58 | 0,73 | 859,50 | 1,22 |
| 15A | 806,79 | -2,62 | 806,71 | -1,51 | 15B | 843,42 | 0,01 | 845,05 | 0,12 |
| 16A | 820,23 | 0,03 | 820,19 | 0,19 | 16B | 810,06 | -4,14 | 851,64 | -3,13 |
| 17A | 830,17 | 0,01 | 830,07 | 0,12 | 17B | 850,17 | -4,99 | 850,10 | -2,45 |
| 18A | 831,25 | 0,00 | 831,24 | 0,01 | 18B | 841,15 | 0,88 | 817,55 | 1,78 |
| 19A | 834,15 | 0,01 | 834,14 | 0,17 | 19B | 829,59 | -0,92 | 820,65 | -0,68 |
| 20A | 832,44 | 0,07 | 832,43 | 0,42 | 20B | 828,42 | 0,63 | 811,13 | 1,32 |
| 21A | 854,79 | 0,12 | 854,73 | 0,47 | 21B | 849,5 | 0,01 | 848,13 | 0,10 |
| 22A | 860,64 | -2,18 | 860,63 | -0,34 | 22B | 869,17 | 0,05 | 869,12 | 0,22 |
| 23A | 891,95 | 0,14 | 891,90 | 0,84 | 23B | 890,87 | 0,05 | 886,93 | 0,28 |
| 24A | 892,73 | 0,7030 | 892,72 | 1,0711 | 24B | 874,9 | -2,81 | 902,68 | -1,95 |

Fonte: autores

O método identificou que os resultados assintóticos calculados a partir das malhas mais refinadas diferem pouco dos valores assintóticos calculados a partir das malhas menos refinadas

com resultados muito próximos para ambos os passes do forno. Os índices GCI calculados também apresentaram valores satisfatórios, com exceção de alguns pontos com módulo maiores do que 4%, o índice se manteve em média, abaixo de 1%, mostrando boa convergência para todas as malhas.

Tabela 5.5: Erros relativos entre valores extrapolados para as soluções para a %temperatura dos tubos sob o plano selecionado

| Tubo | $e_{ext\ 12}$ (%) | $e_{ext\ 23}$ (%) | Tubo | $e_{ext\ 12}$ (%) | $e_{ext\ 23}$ (%) |
|------|-------------------|-------------------|------|-------------------|-------------------|
| 1A | 0,03 | 0,39 | 1B | 0,92 | 0,69 |
| 2A | 0,88 | 2,44 | 2B | 2,39 | 0,41 |
| 3A | 6,01 | 2,27 | 3B | 0,39 | 1,31 |
| 4A | 0,21 | 0,78 | 4B | 1,17 | 1,96 |
| 5A | 0,20 | 1,28 | 5B | 0,01 | 0,15 |
| 6A | 0,10 | 0,62 | 6B | 1,26 | 0,59 |
| 7A | 0,00 | 0,03 | 7B | 0,06 | 0,31 |
| 8A | 0,05 | 0,45 | 8B | 1,18 | 2,69 |
| 9A | 0,03 | 0,35 | 9B | 3,34 | 2,46 |
| 10A | 0,05 | 0,46 | 10B | 1,19 | 0,16 |
| 11A | 4,46 | 1,82 | 11B | 0,12 | 0,17 |
| 12A | 0,11 | 0,01 | 12B | 0,91 | 1,33 |
| 13A | 0,01 | 0,07 | 13B | 0,91 | 0,04 |
| 14A | 0,20 | 0,46 | 14B | 0,58 | 0,97 |
| 15A | 2,15 | 1,23 | 15B | 0,01 | 0,10 |
| 16A | 0,02 | 0,15 | 16B | 3,43 | 2,44 |
| 17A | 0,00 | 0,10 | 17B | 3,84 | 1,92 |
| 18A | 0,00 | 0,01 | 18B | 0,70 | 1,44 |
| 19A | 0,01 | 0,14 | 19B | 0,73 | 0,54 |
| 20A | 0,05 | 0,34 | 20B | 0,50 | 1,07 |
| 21A | 0,10 | 0,38 | 21B | 0,01 | 0,08 |
| 22A | 1,77 | 0,27 | 22B | 0,04 | 0,17 |
| 23A | 0,11 | 0,66 | 23B | 0,04 | 0,22 |
| 24A | 0,56 | 0,85 | 24B | 2,30 | 1,54 |

Fonte: autores

Para os valores extrapolados obteve-se um erro médio de 0,90% comparado a malha mais refinada e valor máximo de 6,01% enquanto que para a malha intermediária para o erro médio comparado ao valor extrapolado foi de 0,79% com erro máximo de 2,69%. Ambas as análises indicam erros aceitáveis quando verificado a média, é perceptível que os valores das malhas menos refinadas se aproximam mais do valor extrapolado quando se compara a mais refinada.

Os gráficos das Figuras 5.3 e 5.4 mostram a comparação entre os resultados das temperaturas calculadas para cada malha e também os pontos extrapolados pelo método de convergência de malha.

Para a análise do passe A também foi verificado que o valor médio de p encontrado foi de 6,02 e que 16,7% dos 24 pontos apresentaram convergência oscilatória. No passe B o valor médio de p encontrado foi de 1,13 e 45,8% dos pontos apresentaram convergência oscilatória. Mesmo com um número maior de pontos apresentando convergência oscilatória se percebe que os resultados das simulações do passe B mais pontos convergindo entre as três malhas, ou seja, ε_{12} e ε_{23} com valores próximos entre si mesmo que em módulo, o que também resulta em valores de p menores.

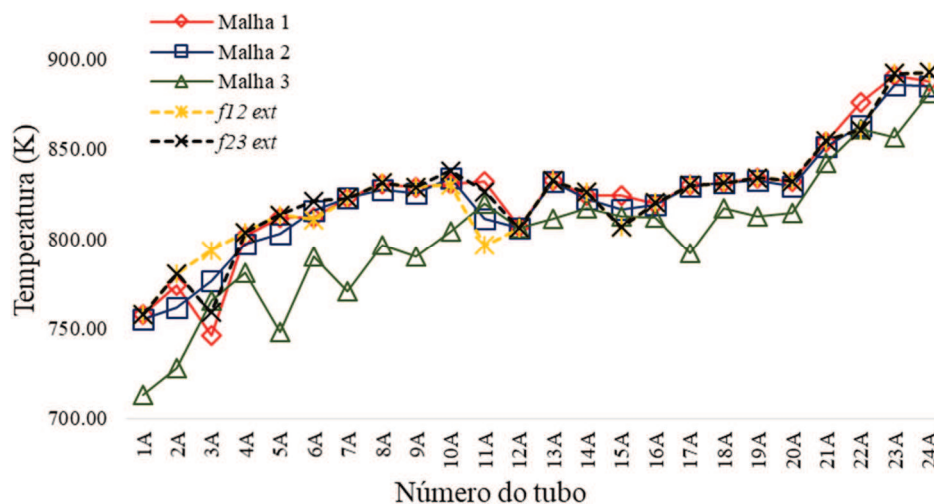


Figura 5.3: Comparação entre os resultados encontrados no passe A para a temperatura no plano dos termopares com os valores extrapolados pelo método GCI

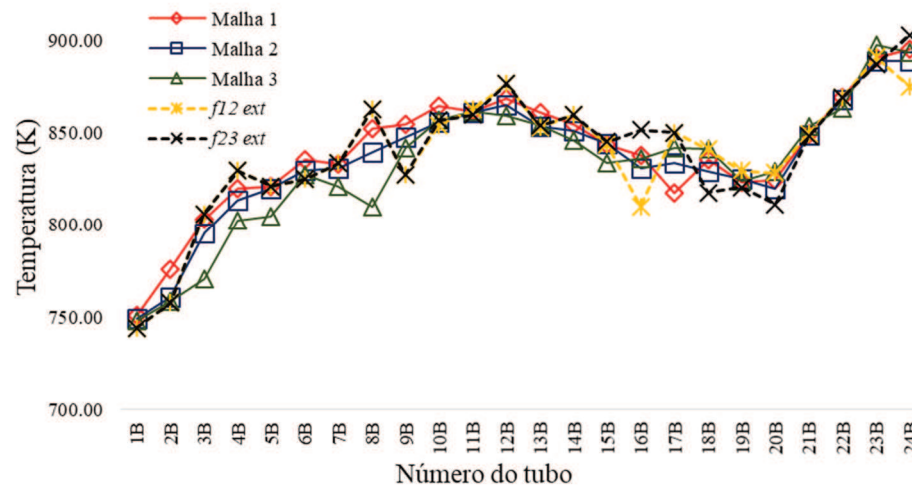


Figura 5.4: Comparação entre os resultados encontrados no passe B para a temperatura no plano dos termopares com os valores extrapolados pelo método GCI

A Tabela 5.6 apresenta alguns dos resultados das simulações das três malhas para algumas variáveis do problema, as quais foram utilizadas para verificação da convergência de malha em função da sua importância dentro do contexto estudado. O método foi aplicado sobre os resultados das temperaturas sobre a posição dos termopares do passe B, que ocupa a região central do forno e, por isso, tendem a sofrer maior variação e amplitude de temperaturas do que o passe A. Também foram verificadas duas variáveis globais de significativa importância para a operação de fornos industriais, as concentrações volumétricas de O_2 e de NO na região de saída do forno.

Tabela 5.6: Frações molares de O_2 e NO nos gases de combustão, temperaturas simuladas para os termopares do passe B do forno

| malha | % O_2 vol. | % NO vol. | P-B t3 (K) | P-B t5 (K) | P-A t12 (K) | P-A t24 (K) |
|-------|--------------|-------------|------------|------------|-------------|-------------|
| 1 | 2,133 | 0,001911 | 802,95 | 820,91 | 868,46 | 895,07 |
| 2 | 2,120 | 0,001870 | 795,52 | 819,76 | 864,79 | 888,42 |
| 3 | 2,117 | 0,001721 | 770,47 | 804,71 | 859,40 | 891,11 |

Fonte: autores

Os dados da Tabela 5.7 mostra que os resultados do teste de convergência de malha se apresentam satisfatórios dentro do que o método propõe para as variáveis acima descritas. Os valores encontrados para os índices GCI_{12} apresentam níveis adequados de precisão para todas as variáveis estudadas, inclusive para a concentração de NO formado, cujos resultados das

simulações apresentaram valores abaixo de 0,002% do volume dos gases expelidos, um resultado bastante interessante devido à complexidade e dimensões do equipamento aqui avaliado numericamente.

O valor de χ calculado para todas as variáveis mostrou que os resultados estão muito próximos da faixa assintótica, pois o índice ficou bastante próximo ao valor 1 para todas as variáveis testadas.

Tabela 5.7: ordem de convergência, e índices de convergência concentrações de O₂, NO e temperaturas nas regiões de localização de termopares.

| | %O ₂ vol. | %NO vol. | P-B t3 (K) | P-B t5 (K) | P-At12 (K) | P-A t24 (K) |
|----------------|----------------------|----------|------------|------------|------------|-------------|
| p (-) | 5,589 | 4,918 | 4,632 | 9,802 | 1,465 | -3,450 |
| GCI_{12} (%) | -0,990 | 1,018 | 0,488 | 0,014 | 1,127 | -1,560 |
| GCI_{23} (%) | -0,230 | 3,781 | 1,660 | 0,190 | 1,662 | -0,635 |
| χ (-) | 1,0061 | 1,0219 | 1,0093 | 1,0014 | 1,0042 | 1,0075 |

Fonte: autores

A conclusão do estudo mostra que a malha 1, com $1,3 \times 10^7$ volumes de controle é apropriada para ser utilizada neste trabalho. Também é possível constatar que um grau de refinamento de malha de 1,3, considerado o mínimo necessário para o estudo, pode apresentar bons resultados, fato importante, pois a modelagem aplicada à simulação exigiu grande esforço computacional. Malhas pouco maiores do que as utilizadas neste trabalho tornariam a resolução do problema proibitiva do ponto de vista computacional para os equipamentos disponíveis.

6 RESULTADOS

Nesta seção apresentam-se os resultados das simulações numéricas do forno feitas utilizando software Ansys CFX 18.1 para a malha de $13,7 \times 10^6$ de volumes de controle. Alguns destes resultados puderam ser comparados aos valores calculados pelo software HTRI Xfh a fim de que se pudesse demonstrar que a solução do modelo resolvido numericamente é coerente com aquela encontrada pelo software dedicado. Da mesma maneira foi possível verificar e comparar as soluções dos softwares para as temperaturas dos tubos com os valores encontrados no histórico operacional do equipamento real. Para consideração de convergência da solução numérica no Ansys adotou-se o RMS - Root Mean Square inferior a 10^{-4} para todas as equações.

Os métodos utilizados nos processos de simulação dos softwares Ansys CFX e HTRI Xfh diferem largamente entre si. Enquanto a modelagem utilizada pelo software Xfh é baseado em histórico de equipamentos e utiliza o método multi-zonas de Hottel (1974), para as simulações em CFD no Ansys CFX existe uma dependência da modelagem empregada pelo usuário, que utiliza a teoria da fluidodinâmica para resolução do problema adotando-se a técnica de Volumes Finitos desenvolvida por Patankar (1980). Contudo, neste trabalho o software HTRI Xfh apresentou papel importante para a criação do modelo em CFD pois, com a sua aplicação, foi possível determinar as condições de contorno relativas às superfícies dos tubos do banco de tubos de aquecimento do forno, por onde circula o produto a ser processado pelo equipamento. A utilização das condições de contorno pré calculadas possibilitou a simplificação do modelo computacional e, conseqüentemente, viabilizou a realização destas simulações.

Entretanto, apesar do modelo em CFD utilizar condições de contorno oriundas do software dedicado HTRI Xfh, os resultados encontrados pelo método numérico convergem até certo ponto com o primeiro. Estas diferenças podem ser atribuídas devido ao detalhamento propiciado pelo método dos volumes finitos e efeitos provocados pela geometria do equipamento que não são contabilizados integralmente no HTRI Xfh.

6.1 COMPARAÇÃO ENTRE AS TEMPERATURAS MÉDIAS CALCULADAS PELOS SOFTWARES ANSYS CFX E HTRI XFH

O método empregado pelo HTRI Xfh diferencia cada tubo em duas regiões principais, uma exposta a chama (*hot skin*) e outra sem exposição (*back skin*). Os resultados encontrados

pelo HTRI Xfh são sempre as médias para estas duas regiões para cada tubo. Assim, para uma comparação apropriada dos resultados foi verificado a diferença entre os resultados encontrados pelo HTRI Xfh com as médias encontradas pelo Ansys CFX. Para levantamento das médias no Ansys CFX cada tubo simulado foi dividido em duas regiões e então foi feita a média para as temperaturas na região exposta a chama (*hot skin*) a Figura 6.1 ilustra com uma visão das seções transversais dos tubos como esta divisão foi feita.

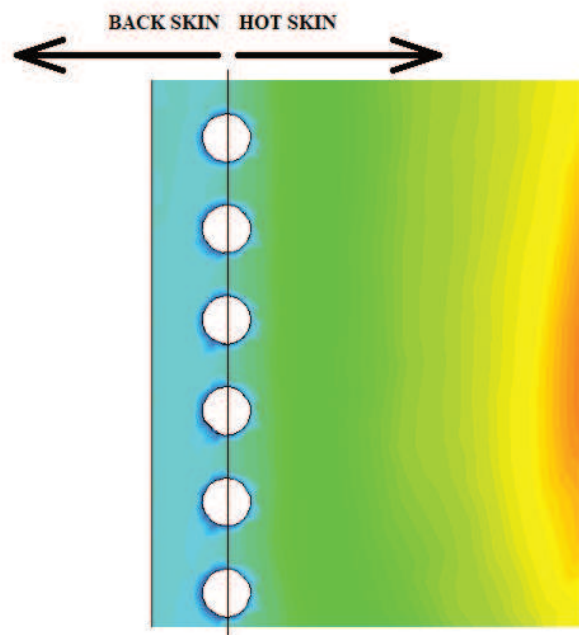


Figura 6.1: Divisão dos tubos em regiões expostas a chama e regiões sem exposição.

Foram comparados neste trabalho as médias para as temperaturas das regiões de hot skin de cada tubo utilizando o Ansys CFX e o HTRI Xfh, nos dois softwares foi verificado que valores encontrados por cada método de simulação apresentam certa convergência como mostram as figuras 6.2 e 6.3.

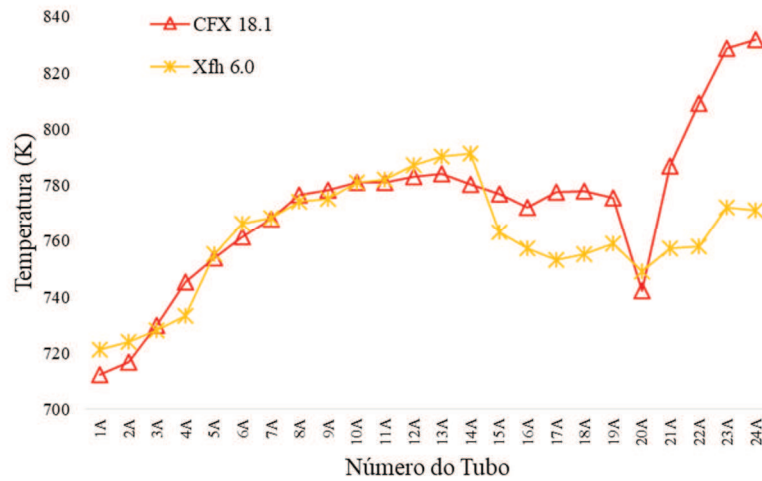


Figura 6.2: Comparação entre a temperaturas médias calculados com Ansys CFX e HTRI Xfh para a região exposta a chama no passe B do forno.

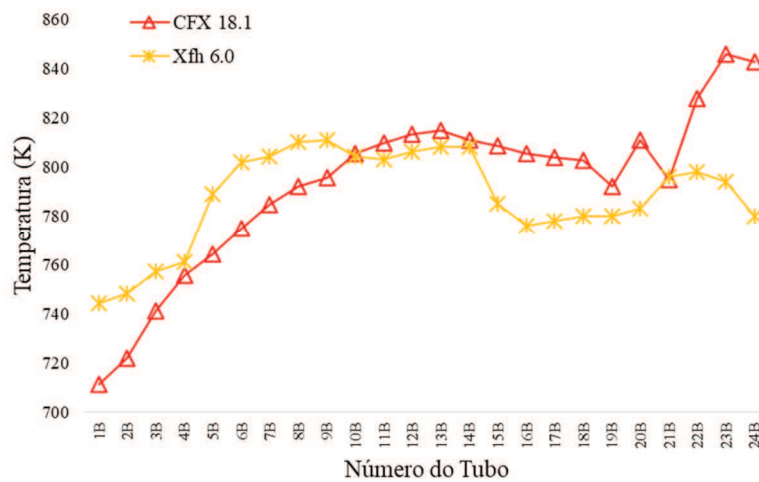


Figura 6.3: Comparação entre a temperaturas médias calculados com Ansys CFX e HTRI Xfh para a região exposta a chama no passe B do forno.

Se verifica que, quando se tratam das médias, os valores encontrados para o Ansys CFX se aproximam mais dos resultados do HTRI Xfh, o que é uma resposta coerente uma vez que na modelagem numérica se utilizou como condições de contorno os valores de h e temperatura do petróleo calculados pelo HTRI Xfh. Se percebe que para o passe A as temperaturas simuladas pelo Ansys CFX se aproximam mais do calculado pelo HTRI Xfh, apresentando uma diferença percentual média entre estes de 1,89%, com máximo de 7,27% para os tubos do localizados na região do topo da radiação. O passe B apresentou maior divergência na

comparação entre os dois modelos, com diferença percentual de média dos resultados de 2,60%, com máximo de 7,42% para os tubos do topo da radiação. Para ambos os passes as temperaturas dos tubos que se encontram no topo da zona de radiação do forno apresentaram diferenças máximas da ordem de 60 K, o que demonstra que mesmo para valores médios calculados pelo Ansys CFX, os dois métodos apresentam diferenças nos resultados devido aos métodos de resolução empregados. As diferenças entre as médias para os tubos calculadas pelo Ansys CFX 18.1 e HTRI Xfh 6.0 podem ser verificadas na tabela 6.1.

Tabela 6.1: Diferenças entre as médias calculadas pelos softwares Ansys CFX 18.1 e HTRI Xfh por tubo para os passes A e B

| Tubo | CFX (K) | Xfh (K) | ΔT (K) | % | Tubo | CFX (K) | Xfh (K) | ΔT (K) | % |
|------|---------|---------|----------------|------|------|---------|---------|----------------|------|
| 1A | 711,08 | 721,15 | 10,07 | 1,40 | 1B | 712,14 | 744,15 | 32,01 | 4,30 |
| 2A | 716,95 | 724,15 | 7,2 | 0,99 | 2B | 720,79 | 748,15 | 27,36 | 3,66 |
| 3A | 728,87 | 728,15 | 0,72 | 0,10 | 3B | 741,03 | 757,15 | 16,12 | 2,13 |
| 4A | 744,12 | 733,15 | 10,97 | 1,50 | 4B | 756,23 | 761,15 | 4,92 | 0,65 |
| 5A | 753,89 | 755,15 | 1,26 | 0,17 | 5B | 762,44 | 789,15 | 26,71 | 3,38 |
| 6A | 764,67 | 766,15 | 1,48 | 0,19 | 6B | 777,92 | 802,15 | 24,23 | 3,02 |
| 7A | 767,98 | 768,15 | 0,17 | 0,02 | 7B | 782,65 | 804,15 | 21,5 | 2,67 |
| 8A | 775,27 | 774,15 | 1,12 | 0,14 | 8B | 790,28 | 810,15 | 19,87 | 2,45 |
| 9A | 776,21 | 775,15 | 1,06 | 0,14 | 9B | 794,39 | 811,15 | 16,76 | 2,07 |
| 10A | 780,79 | 781,15 | 0,36 | 0,05 | 10B | 804,11 | 804,15 | 0,04 | 0,00 |
| 11A | 781,01 | 782,15 | 1,14 | 0,15 | 11B | 809,31 | 803,15 | 6,16 | 0,77 |
| 12A | 784,56 | 787,15 | 2,59 | 0,33 | 12B | 812,57 | 806,15 | 6,42 | 0,80 |
| 13A | 787,03 | 790,15 | 3,12 | 0,39 | 13B | 813,72 | 808,15 | 5,57 | 0,69 |
| 14A | 780,42 | 791,15 | 10,73 | 1,36 | 14B | 810,94 | 808,15 | 2,79 | 0,35 |
| 15A | 775,91 | 763,15 | 12,76 | 1,67 | 15B | 809,17 | 785,15 | 24,02 | 3,06 |
| 16A | 774,12 | 757,15 | 16,97 | 2,24 | 16B | 806,22 | 776,15 | 30,07 | 3,87 |
| 17A | 775,22 | 753,15 | 22,07 | 2,93 | 17B | 805,88 | 778,15 | 27,73 | 3,56 |
| 18A | 775,46 | 755,15 | 20,31 | 2,69 | 18B | 802,41 | 780,15 | 22,26 | 2,85 |
| 19A | 774,09 | 759,15 | 14,94 | 1,97 | 19B | 790,25 | 780,15 | 10,1 | 1,29 |
| 20A | 742,85 | 749,15 | 6,3 | 0,84 | 20B | 810,55 | 780,15 | 30,4 | 3,90 |
| 21A | 787,61 | 757,15 | 30,46 | 4,02 | 21B | 793,64 | 794,15 | 0,51 | 0,06 |
| 22A | 808,45 | 758,15 | 50,3 | 6,63 | 22B | 828,47 | 798,15 | 30,32 | 3,80 |
| 23A | 827,64 | 772,15 | 55,49 | 7,19 | 23B | 843,15 | 796,15 | 47 | 5,90 |
| 24A | 832,15 | 771,15 | 61 | 7,91 | 24B | 840,84 | 783,15 | 57,69 | 7,37 |

Fonte: autores

Esta proximidade nos resultados encontrados pode ser vista como uma vantagem para o HTRI Xfh, uma vez que o software é capaz de calcular as médias para as temperaturas de

maneira sem necessidade da mesma capacidade computacional que o método numérico demanda para resolver o mesmo problema.

6.2 COMPARAÇÃO ENTRE AS MÁXIMAS TEMPERATURAS DE SUPERFÍCIE DOS TUBOS

Um dos principais diferenciais da simulação numérica é a divisão do volume de controle em múltiplas células, que para cada uma, serão resolvidas as equações diferenciais do problema de fluidodinâmica, assim sendo possível determinar resultados pontuais no problema a ser resolvido. Infelizmente as soluções determinadas pelo HTRI Xfh não possuem as mesmas características, o software é capaz apenas de determinar a temperatura média por região como visto nos resultados do Capítulo 6.1. A justificativa para comparar valores médios comparados por um software com valores máximos pontuais do outro faz-se necessário pelo ponto de vista estrutural, pois, como o Ansys CFX pode determinar temperaturas pontuais mais elevadas do que as médias de temperatura encontradas pelo HTRI Xfh, a análise numérica pode representar uma maior segurança para determinar pontos de sobreaquecimento no interior da câmara do forno.

Apesar de se utilizar os coeficientes de troca térmica calculados previamente pelo software HTRI Xfh como condições de contorno para as superfícies dos tubos, prescrevendo-se as condições de convecção no seu interior, os resultados para as magnitudes dos perfis de temperaturas máximas de cada tubo obtidos com as simulações no Ansys CFX apresentaram valores mais elevados, como se pode verificar nas Figuras 6.3 e 6.4.

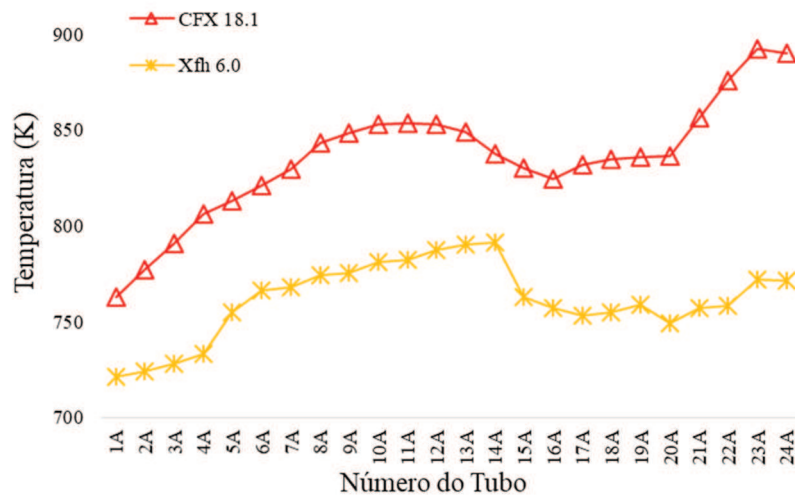


Figura 6.3: Máxima temperatura atingida nas superfícies por tubo no Passe A.

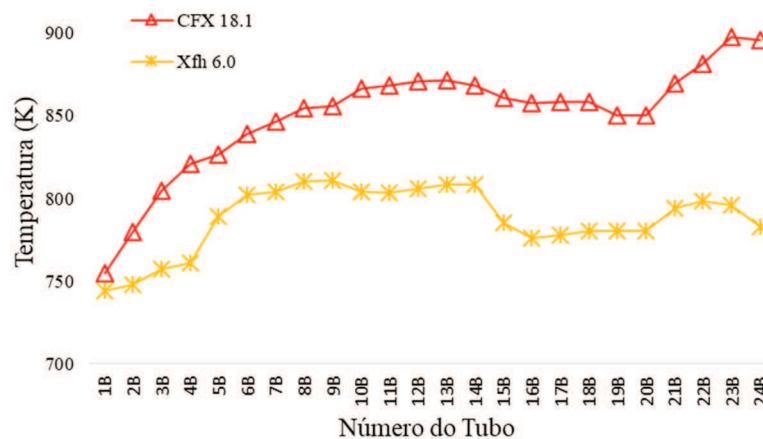


Figura 6.4: Máxima temperatura atingida nas superfícies por tubo no passe B.

A diferença entre os resultados obtidos com as duas simulações é da ordem de 15% em média, diferença está atribuída aos diferentes métodos e modelagens aplicadas em cada software para a realização dos cálculos. Como o CFX utiliza o Método dos Volumes Finitos a precisão para a resposta das temperaturas dentro do domínio dependerá do tamanho das células utilizadas, então a máxima temperatura calculada para cada tubo diz respeito a uma célula ou a um pequeno conjunto de células delimitadas na malha do tubo em questão. Já o Xfh precisa trabalhar com zonas do forno de tamanho mínimo limitado e, assim, seus resultados apesar de coerentes, serão valores médios globais de uma região avaliada, no caso, a temperatura máxima para todo o tubo. As diferenças entre as máximas temperaturas calculadas por tubo pelo software Ansys CFX 18.1 e HTRI Xfh 6.0 podem ser verificadas na Tabela 6.2.

Tabela 6.2: Diferenças entre as temperaturas máximas calculadas pelos softwares Ansys CFX 18.1 e HTRI Xfh por tubo para os passes A e B

| Tubo | CFX (K) | Xfh (K) | ΔT (K) | % | Tubo | CFX (K) | Xfh (K) | ΔT (K) | % |
|------|---------|---------|----------------|-------|------|---------|---------|----------------|--------|
| 1A | 762,88 | 721,15 | 41,73 | 5,79 | 1B | 755,10 | 744,15 | 10,95 | 1,47 |
| 2A | 777,04 | 724,15 | 52,89 | 7,30 | 2B | 779,57 | 748,15 | 31,42 | 4,20 |
| 3A | 790,93 | 728,15 | 62,78 | 8,62 | 3B | 804,86 | 757,15 | 47,71 | 6,30 |
| 4A | 806,05 | 733,15 | 72,90 | 9,94 | 4B | 820,59 | 761,15 | 59,44 | 7,81 |
| 5A | 813,11 | 755,15 | 57,96 | 7,68 | 5B | 826,76 | 789,15 | 37,61 | 4,77 |
| 6A | 820,99 | 766,15 | 54,84 | 7,16 | 6B | 839,06 | 802,15 | 36,91 | 4,60 |
| 7A | 829,84 | 768,15 | 61,69 | 8,03 | 7B | 846,74 | 804,15 | 42,59 | 5,30 |
| 8A | 843,19 | 774,15 | 69,04 | 8,92 | 8B | 854,53 | 10,15 | 44,38 | 437,24 |
| 9A | 848,16 | 775,15 | 73,01 | 9,42 | 9B | 855,93 | 811,15 | 44,78 | 5,52 |
| 10A | 852,81 | 781,15 | 71,66 | 9,17 | 10B | 866,13 | 804,15 | 61,98 | 7,71 |
| 11A | 853,43 | 782,15 | 71,28 | 9,11 | 11B | 868,32 | 803,15 | 65,17 | 8,11 |
| 12A | 853,07 | 787,15 | 65,92 | 8,37 | 12B | 870,60 | 806,15 | 64,45 | 7,99 |
| 13A | 849,26 | 790,15 | 59,11 | 7,48 | 13B | 871,57 | 808,15 | 63,42 | 7,85 |
| 14A | 837,39 | 791,15 | 46,24 | 5,84 | 14B | 868,24 | 808,15 | 60,09 | 7,44 |
| 15A | 830,40 | 763,15 | 67,25 | 8,81 | 15B | 861,10 | 785,15 | 75,95 | 9,67 |
| 16A | 824,52 | 757,15 | 67,37 | 8,90 | 16B | 857,66 | 776,15 | 81,51 | 10,50 |
| 17A | 831,64 | 753,15 | 78,49 | 10,42 | 17B | 858,25 | 778,15 | 80,10 | 10,29 |
| 18A | 834,48 | 755,15 | 79,33 | 10,51 | 18B | 858,36 | 780,15 | 78,21 | 10,02 |
| 19A | 835,76 | 759,15 | 76,61 | 10,09 | 19B | 849,91 | 780,15 | 69,76 | 8,94 |
| 20A | 836,53 | 749,15 | 87,38 | 11,66 | 20B | 850,49 | 780,15 | 70,34 | 9,02 |
| 21A | 856,46 | 757,15 | 99,31 | 13,12 | 21B | 869,40 | 794,15 | 75,25 | 9,48 |
| 22A | 875,89 | 758,15 | 117,74 | 15,53 | 22B | 881,49 | 798,15 | 83,34 | 10,44 |
| 23A | 892,48 | 772,15 | 120,33 | 15,58 | 23B | 897,36 | 796,15 | 101,21 | 12,71 |
| 24A | 890,27 | 771,15 | 119,12 | 15,45 | 24B | 895,50 | 783,15 | 112,35 | 14,35 |

Fonte: autores

Com os valores apresentados na Tabela 6.2 fica clara a diferença entre os dois métodos para a identificação das máximas temperaturas para as superfícies dos tubos no forno. Como estas diferenças para as máximas temperaturas podem chegar a mais de 100 K, como verificado nos tubos 22A, 23A, 24A, 23B e 24B, o modelo numérico pode ser capaz de verificar possíveis pontos na estrutura dos tubos onde possa haver fragilização ou necessidade de adequações em relação à qualidade do aço utilizado na sua fabricação.

6.3 ANÁLISE GRÁFICA DE RESULTADOS

Uma vantagem da análise em CFD para o caso do forno é a possibilidade de se poder analisar toda a superfície de um tubo estudado, assim identificando a existência de mais pontos de temperatura superficial elevada ou situações onde um tubo pode não estar apresentando um rendimento térmico adequado. A Figura 6.6 mostra a distribuição de temperaturas nas superfícies dos tubos obtidas pelo Ansys CFX 18.1, visualizando o forno em 3 dimensões.

Complementando, a Figura 6.7 mostra numa vista frontal a distribuição de temperaturas das superfícies dos tubos na região que se encontra exposta à chama na câmara de combustão. Nesta figura é possível constatar que uma parte significativa dos tubos acaba exposta a um gradiente severo de temperaturas, com magnitudes chegando a 900 K e outras partes menos afetadas pelo calor da chama, com temperaturas bem mais baixas, da ordem de 700 K, indicando que a distribuição do calor no forno não é homogênea, possibilitando a implementação de melhorias neste sentido, o que certamente poderá gerar aumento de eficiência no processamento do produto.

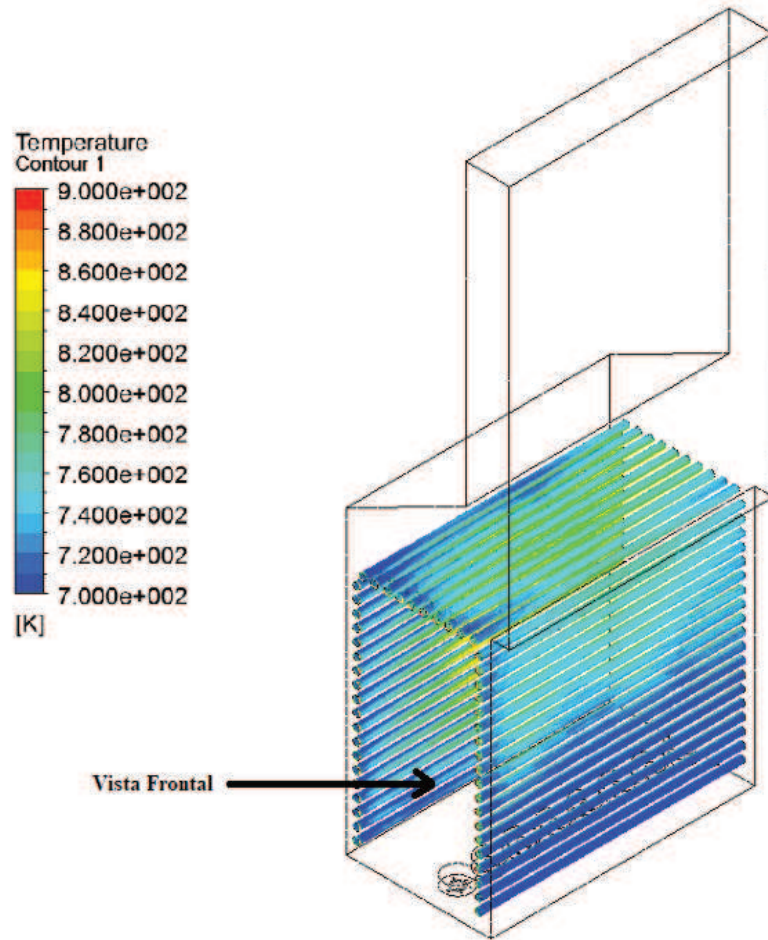


Figura 6.6: Distribuição de temperatura sobre as superfícies dos tubos no forno.

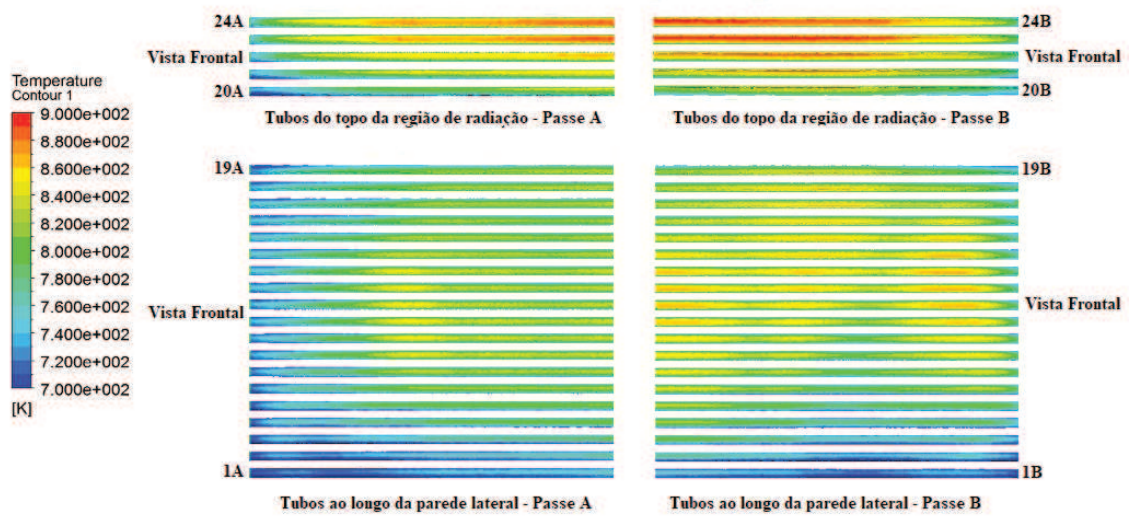


Figura 6.7: Distribuição de temperaturas das superfícies dos tubos na região da câmara de combustão.

Ao se analisar a distribuição de temperaturas nas superfícies dos tubos percebe-se também que a temperatura dos tubos 23 e 24 dos passes A e B apresentam maior temperatura do que todo o resto, o que condiz com o esperado, pois é a região onde o fluido no interior dos tubos atinge sua maior temperatura e os efeitos da convecção na superfície são acentuados. Também é verificado que as superfícies dos tubos do passe B atingem temperaturas mais elevadas do que os do passe A. Este fenômeno parece estar ligado ao favorecimento do aquecimento convectivo provocado pela maior vazão de gases de combustão na região central do forno devido a sua geometria. A Figura 6.8 mostra, em uma vista frontal, linhas de velocidade que identificam que o fluxo de gases de combustão tende a ser mais intenso no centro vertical axial do equipamento.

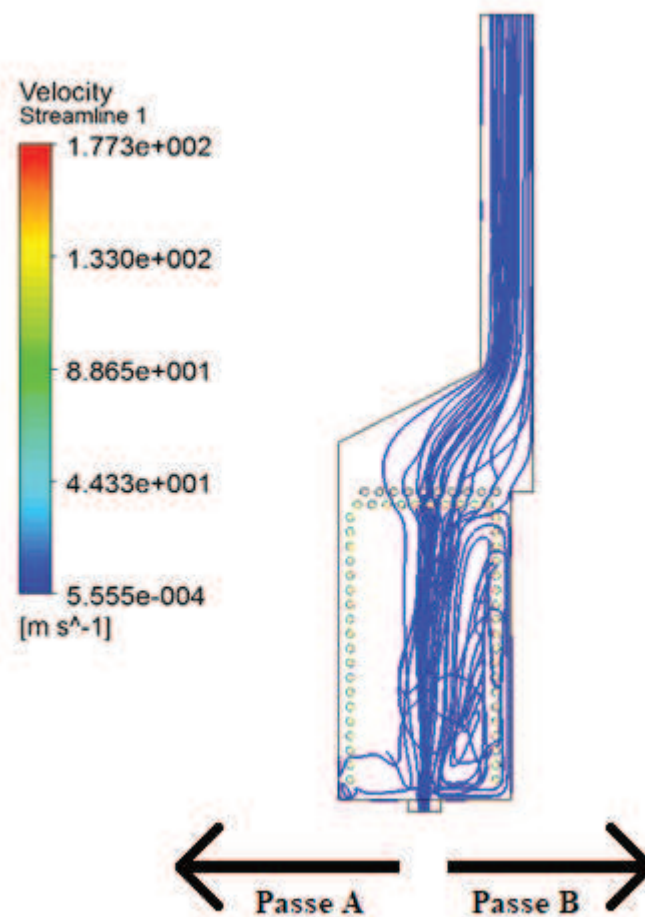


Figura 6.8: Linhas de velocidade verificadas no forno

6.4 PERFIL DO FLUXO DE CALOR PARA OS TUBOS

As diferentes metodologias empregadas pelos dois softwares para chegar aos valores das variáveis de processo acabam por encontrar resultados diferentes para o mesmo problema, enquanto que o Ansys CFX encontra diferentes valores para cada variável ao longo de um grande número de pontos nas superfícies dos tubos, o HTRI Xfh encontra valores médios para cada variável do tubo sem identificar pontuais variações. No caso do fluxo de calor, o programa pode calcular o valor médio para cada tubo, sem distinção da região, então para poder ser comparado com o fluxo encontrado pelo Ansys CFX, foi feita uma média por tubo dos pontos calculados.

Percebe-se que os valores calculados entre os softwares HTRI Xfh e Ansys CFX diferem em 23,25% para os tubos do passe A e 26,53% para os tubos do passe B, ambos apresentando resultados dentro da mesma ordem de grandeza. Mas a grande diferença encontrada nos valores foi atribuída à modelagem e a metodologia de cálculo utilizada em cada software. As Figuras 6.6 e 6.7 comparam os perfis dos fluxos de calor médio nas superfícies dos tubos calculados pelos dois softwares para os passes A e B.

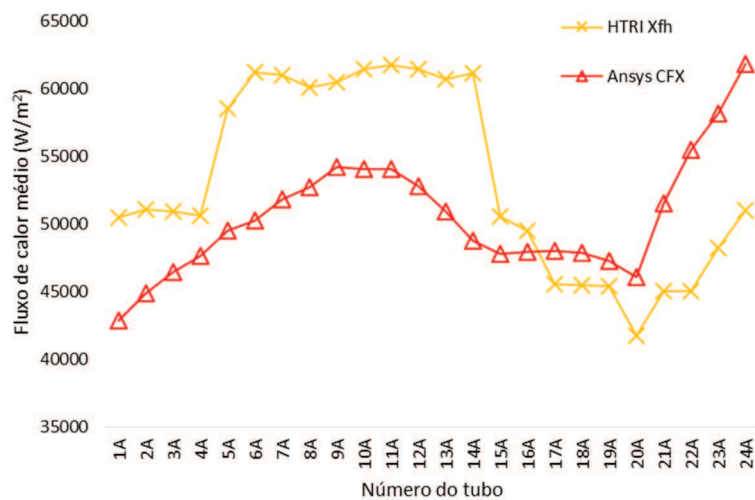


Figura 6.6: Fluxo de calor médio Passe A

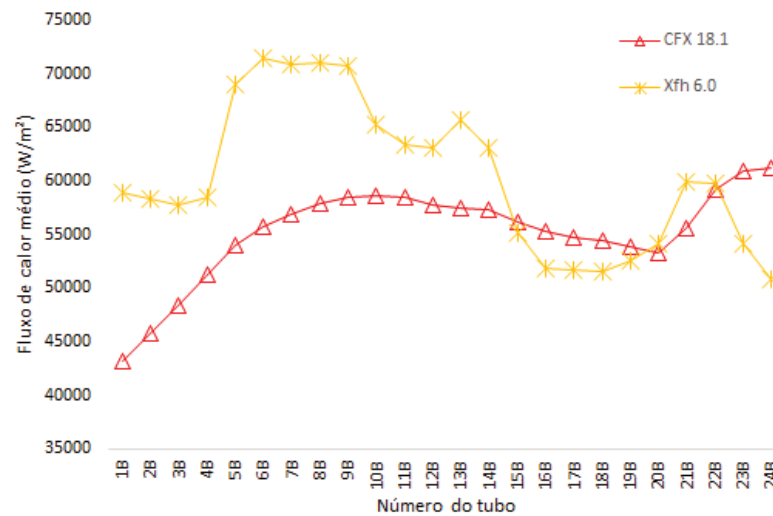


Figura 6.7: Fluxo de calor médio Passe B

Percebe-se que tanto o HTRI Xfh quanto o Ansys CFX calcularam que o passe B do forno opera sob uma condição de maior fluxo de calor para este passe. O fluxo térmico médio por passe é mostrado na Tabela 6.2.

Tabela 6.2: Comparação entre os softwares Ansys CFX e HTRI Xfh para o fluxo de calor médio para os passes do forno

| Fluxo de calor médio | Xfh (W/m ²) | CFX (W/m ²) |
|----------------------|-------------------------|-------------------------|
| Passe A | 53.299,41 | 50.562,97 |
| Passe B | 60.636,91 | 55.263,63 |

Fonte: autores

6.5 PERFIS DE TEMPERATURA E INTENSIDADE DE RADIAÇÃO VERIFICADOS PELO ANSYS CFX

Uma das principais vantagens do CFD é a possibilidade da verificação pontual dos resultados considerando-se a influência do comportamento fluidodinâmico ao longo de todo o domínio. Assim é possível identificar regiões de transição como em variações bruscas de velocidades e temperaturas, por exemplo. A utilização de ferramentas gráficas potencializa esta característica, possibilitando a identificação visual de zonas de transição. A Figura 6.8 mostra

uma visualização do campo de temperaturas em um plano central da câmara de combustão do forno.

Pode-se verificar na figura a fila de queimadores, parte inferior da imagem, onde se tem as entradas dos fluxos de ar e gás combustível com temperaturas de 300 K e 540 K, respectivamente. Em uma região mais acima, onde se percebe a elevação da temperatura até níveis de 2062 K, identifica-se que a reação de combustão está acontecendo, ou seja, a chama propriamente dita, aproximando-se da temperatura adiabática de chama do metano que, segundo Smith et al. (1952), que seria de 2230 K para uma mistura estequiométrica de combustível. Então na região mais acima da figura as temperaturas verificadas ficam entre 1000 K a 1400 K, são referentes aos gases provenientes da combustão.

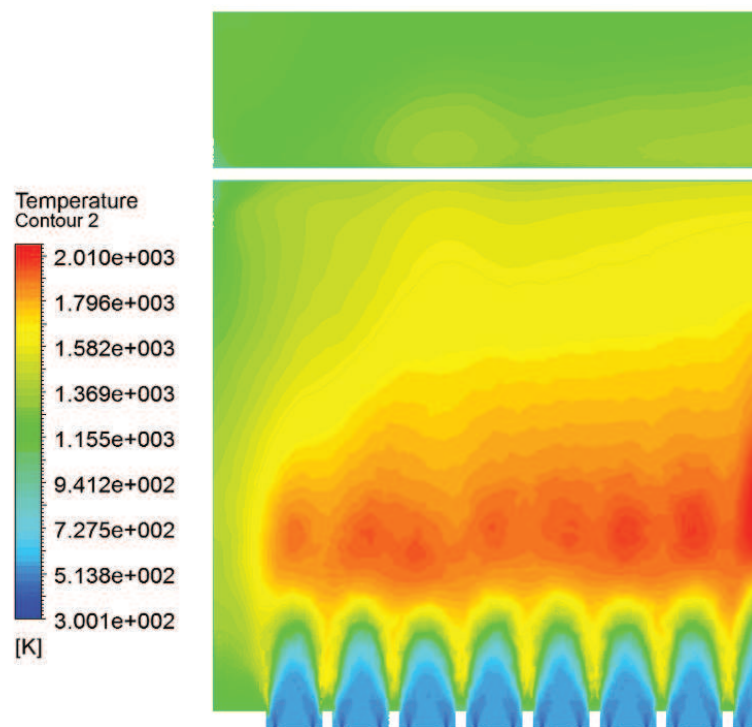


Figura 6.8: Distribuição de temperaturas no plano central do forno.

A Figura 6.8 apresenta a distribuição de temperaturas numa vista lateral de um plano ao centro do forno, onde se pode visualizar apenas o queimador central do equipamento. Com esta visualização se percebem as mesmas temperaturas identificadas na Figura 6.9, percebe-se que dentro da região de maior temperatura não há tubos do forno, a exposição destes componentes a chama diretamente poderia danificar sua estrutura. As regiões de maior elevação de temperatura indicam que nestes pontos a taxa de reações devem também ser acentuadas. Como

esperado, a distribuição das intensidades de radiação (Figuras 6.10 e 6.11) mostram maiores magnitudes nas regiões de temperatura elevada e menores magnitudes nas regiões de temperaturas mais baixas, como esperado.

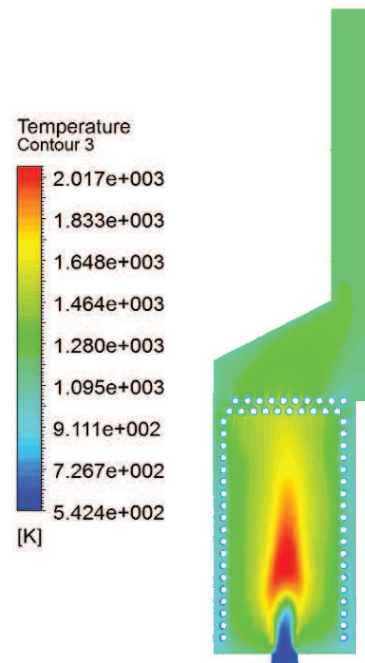


Figura 6.9: Distribuição de temperaturas no plano do queimador central – vista lateral do forno.

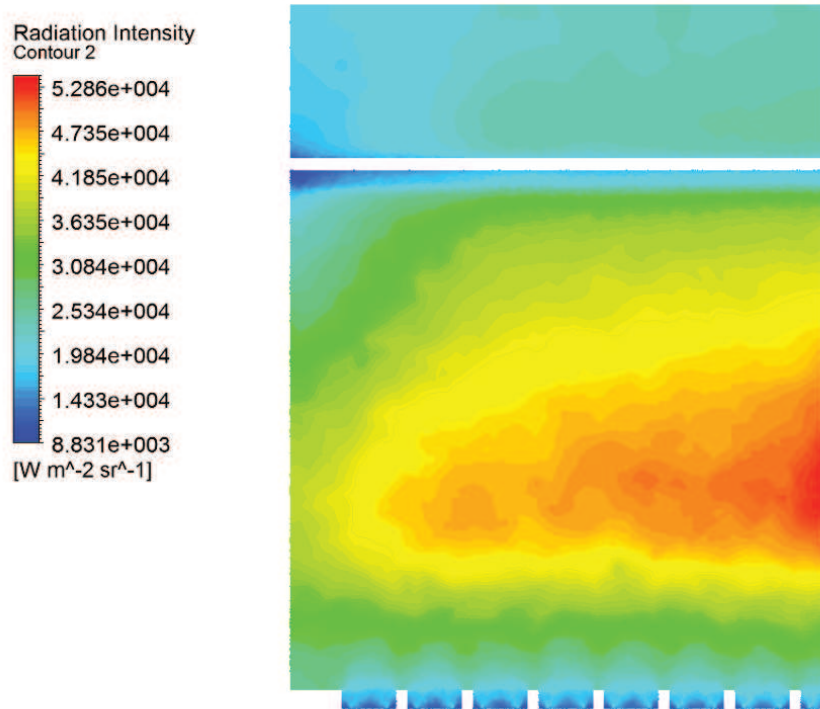


Figura 6.10: Perfil de intensidade de radiação no plano central do forno.

A Figura 6.11 mostra no mesmo plano da Figura 6.9 o campo de intensidades de radiação para o queimador ao centro do forno. Verifica-se que a radiação é mais acentuada nas regiões limitadas pelos tubos, na zona central da câmara de combustão, promovendo as maiores trocas de energia, como desejado. Já para os tubos da região superior da câmara de combustão do forno, onde se tem duplo passe, os tubos no primeiro passe acabam criando uma sombra para a última linha de tubos ou o segundo passe, minimizando o efeito da radiação superficial na sua troca térmica, minimizando também a capacidade de aquecimento, os quais tem a convecção dos gases quentes como principal fonte de troca de calor.

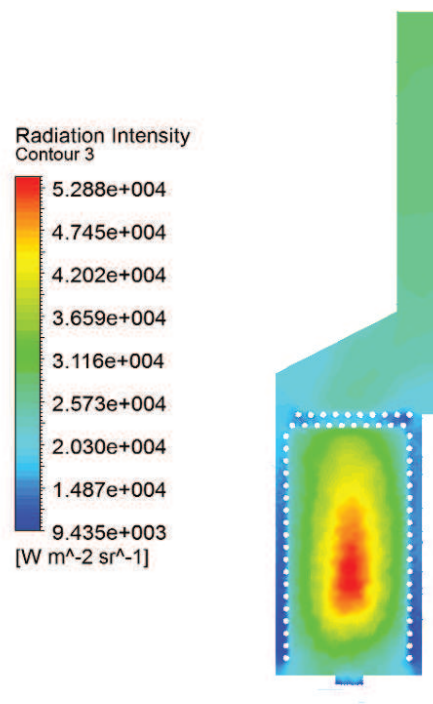


Figura 6.11: Distribuição de intensidade de radiação no plano do queimador central – vista lateral do forno.

Estas análises das distribuições de temperaturas e de intensidades de radiação térmica são importantes durante a etapa de projeto de fornos, com elas torna-se possível avaliar a melhor posição de termopares ou outros instrumentos ao longo das superfícies dos tubos, bem como verificação dos limites para sobreaquecimento dos materiais que compõem o forno, fundamentais para sua operação e segurança.

6.6 FORMAÇÃO DE ESPÉCIES QUÍMICAS

O método do cálculo numérico para a determinação das frações mássicas das principais espécies químicas no processo de combustão do metano aplicado pela modelagem do Ansys CFX permitiu a verificação da formação de espécies químicas provenientes das reações do processo de combustão no forno. Os modelos empregados no método numérico identificaram que para as condições de contorno empregadas há formação de CO e NO mesmo que percentualmente muito baixa comparadas às demais espécies formadas.

O modelo empregado no HTRI Xfh não realiza este cálculo de formação de outras espécies químicas além das reações estequiométricas da reação do combustível e oxigênio. A

comparação das espécies presentes nos gases de combustão para os dois softwares pode ser vista na Tabela 6.3, sendo que os valores obtidos no CFX estão na região de saída do forno e são valores médios em relação à área de passagem do fluxo em cada volume de controle.

Tabela 6.3: Comparação entre a composição dos gases de combustão dos modelos desenvolvidos nos softwares Ansys CFX e HTRI Xfh.

| Espécie química | CH ₄ | CO | CO ₂ | H ₂ O | N ₂ | NO | O ₂ |
|-----------------|-----------------|------|-----------------|------------------|----------------|-------|----------------|
| CFX (ppm) | 0,488 | 1,36 | 85143 | 170271 | 723428 | 13,46 | 21141 |
| Xfh(ppm) | 0 | 0 | 85421 | 170829 | 713651 | 0 | 21136 |

Fonte: autores

A modelagem numérica mostrou-se particularmente interessante para a verificação da formação de espécies químicas no processo de combustão. Apesar do estudo não ter feito uma avaliação da formação de espécies químicas para situações de combustível com maior grau de efeitos nocivos à atmosfera, sua aplicação é perfeitamente viável à simulação numérica.

6.7 COMPARAÇÃO COM O MODELO REAL

Como visto no Cap. 5, os resultados encontrados para as simulações numéricas apresentaram, pelo método GCI, incertezas numéricas com valores razoáveis o que é um bom indicativo que a modelagem desenvolvida seja capaz de representar o problema físico do forno industrial.

O forno industrial que serviu de modelo para este trabalho é equipado com instrumentação adequada para que sejam monitoradas suas principais características ou variáveis operacionais como vazão de gás combustível, vazão de ar, temperatura do fluido aquecido e temperatura de superfície de alguns tubos da serpentina de aquecimento entre outras. Algumas destas variáveis operacionais foram utilizadas como condições de contorno no presente estudo, tais como as vazões de ar e de combustível. A fim de melhor avaliar o erro implícito na modelagem, os resultados do modelo desenvolvido precisam ser comparados com os resultados experimentais do equipamento real, a fim de que se possa identificar as divergências associadas à modelagem numérica e também se verificar a confiabilidade da mesma.

As principais variáveis as quais se tem interesse neste estudo são as temperaturas superficiais dos tubos no forno. Assim, para a avaliação dos resultados obtidos na simulação foi verificado no projeto do forno original a posição dos termopares que são responsáveis por avaliar a temperatura da superfície dos tubos da serpentina de aquecimento. Entretanto, foi constatado que o equipamento possui um número relativamente pequeno de termopares quando se compara ao número de tubos. As câmaras possuem de 8 e 9 termopares distribuídos sob os tubos, como mostra Tabela 6.4.

Tabela 6.4: Tubos onde estão localizados os termopares do forno

| | Câmara norte | | Câmara sul | |
|-------|-----------------|--------------|--------------|--------------|
| | Passe A | Passe B | Passe A | Passe B |
| Tubos | 5, 7, 9, 12, 18 | 3, 5, 12, 24 | 5, 8, 11, 18 | 3, 5, 12, 24 |

Fonte: autores

A Figura 6.13 mostra a localização destes termopares nos tubos do forno estudado.

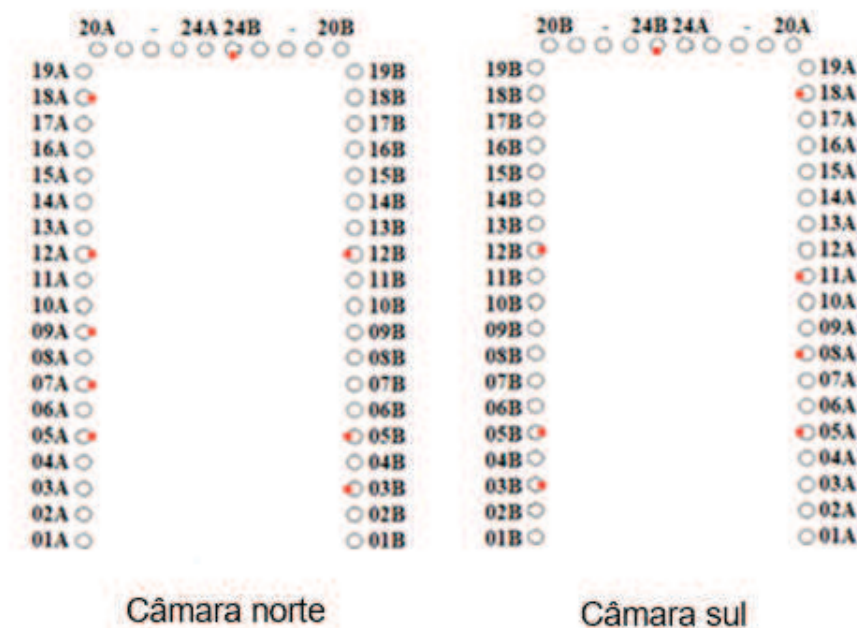


Figura 6.13: Localização dos termopares disponíveis no forno.

A partir do histórico operacional do forno foi possível verificar a temperatura que cada um destes termopares indicava quando o forno operava sob as condições utilizadas nas modelagens com Ansys CFX e com HTRI Xfh. Os resultados encontrados podem ser verificados nas Figuras 6.13 e 6.14.

Os perfis de temperaturas das Figuras 6.13 e 6.14 apresentam os resultados dos termopares das duas câmaras de aquecimento sendo necessário frisar que cada câmara possui dois passes, totalizando 4 passes por onde o fluido escoava de forma independente um do outro.

A percepção que se tem dos resultados ao se comparar os dados simulados com os valores encontrados nos termopares é de que o Ansys CFX tende a apresentar resultados mais próximos aos que os termopares do forno indicam para quando as temperaturas dos tubos se aproximam mais dos 800 K, enquanto que o HTRI Xfh obteve resultados mais próximos aos instrumentos para temperaturas inferiores aos 800 K. Tanto os resultados encontrados pelo Ansys CFX quanto HTRI Xfh estão na mesma faixa de temperatura dos valores reportados pelo histórico dos termopares. As diferenças máximas encontradas entre os valores das simulações e dos termopares foi de 13,0% no CFX e 17,6% no Xfh. Ao se observar os resultados apresentados no capítulo de validação da modelagem, percebe-se praticamente esta mesma faixa de erros, aceitável para a magnitude das dificuldades apresentadas nos fenômenos modelados.

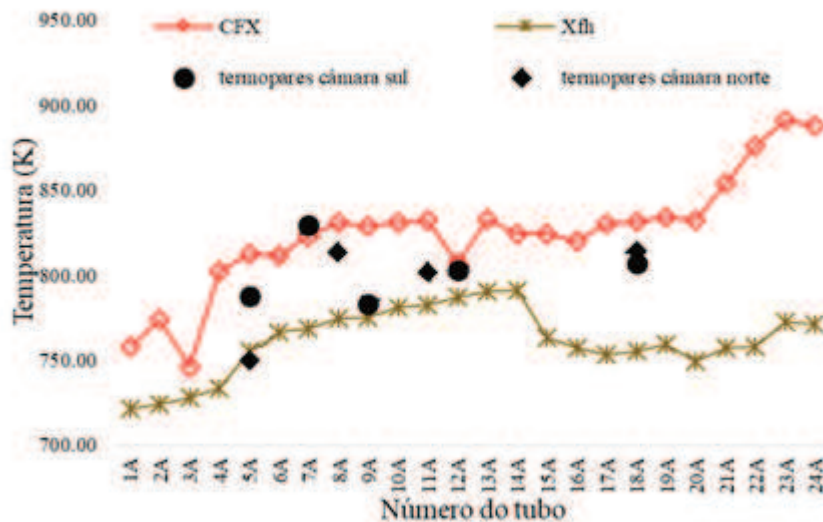


Figura 13: Comparação dos resultados dos softwares CFX e Xfh com os valores reportados pelos termopares do forno para os passes A das câmaras norte e sul.

Se percebe que os termopares dos passes B das câmaras norte e sul apresentam valores de temperatura maiores do que os dos passes A para tubos encontrados na mesma altura e os termopares dos tubos 20B e 24B indicam temperaturas semelhantes aos encontrado pelo Ansys

CFX enquanto que o HTRI apresentou maior convergência com os tubos 3B e 5B. As diferenças encontradas pelos dois modelos já foram atribuídas à metodologia de cálculo empregados por cada software, mas as diferenças para os termopares do forno em operação podem ser atribuídas a uma série de fatores inerentes ao processo ao qual o equipamento está incluso. Segundo Fouzia e Park (2017) o escoamento bifásico e a formação de coque nos tubos dos fornos da indústria petroquímica são os principais fatores que influenciam a elevação de temperatura e nas diferenças de vazões na serpentina de aquecimento. Ou seja, o fluxo de petróleo pode ser comprometido pela formação de coque na parede interna dos tubos ou devido a vaporização do fluido, podendo assim haver diferença nas vazões entre tubos.

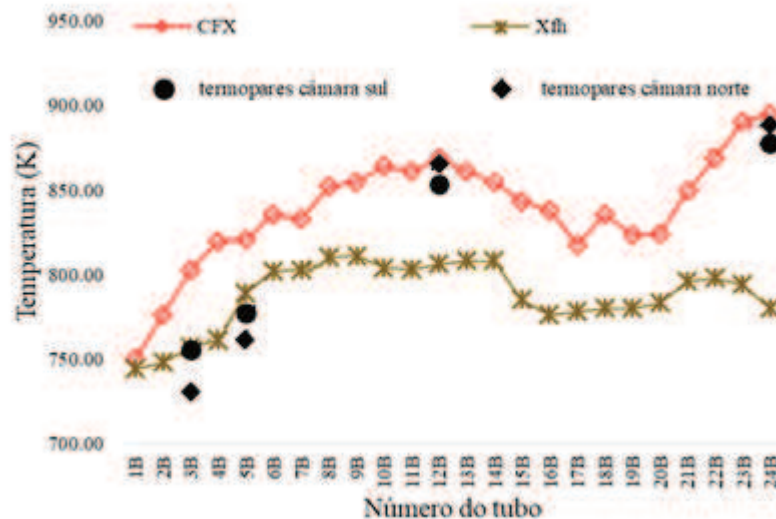


Figura 6.14: Comparação dos resultados dos softwares CFX e Xfh com os valores reportados pelos termopares do forno para os passes B das câmaras norte e sul.

Observa-se tanto na Figura 6.13 quanto na 6.14 a resposta obtida pelo Ansys CFX 18.1 na posição dos termopares apresenta temperaturas mais elevadas do que as obtidas pelo HTRI Xfh 6.0, logo a solução apresentada pelo método numérico pode ser tida como a mais segura do ponto de vista da avaliação estrutural.

7 CONCLUSÕES

Este trabalho apresentou simulações numéricas dos processos de combustão turbulenta de metano e ar não pré-misturados no interior de uma câmara de combustão de um forno de uma unidade de planta petroquímica, com o objetivo de desenvolver uma modelagem que fosse capaz de representar o processo de queima e a consequente transferência de calor da chama aos tubos e paredes do equipamento, afim de identificar as temperaturas ao longo de todo comprimento dos tubos da serpentina de aquecimento.

A modelagem desenvolvida se deu a partir de dados da geometria de um forno que opera atualmente em uma planta petroquímica no Rio Grande do Sul, utilizando um quarto das dimensões do equipamento original considerando as simetrias frontal e lateral do equipamento como limites do domínio computacional, assim a câmara de combustão também precisou utilizar um quarto do número de queimadores para as simulações. Condições operacionais de pressão da câmara de combustão e vazões de gás combustível bem como dados operacionais do processo ao qual o equipamento encontra-se inserido foram utilizadas como algumas das condições de contorno para a modelagem.

As simulações numéricas foram realizadas pelo método dos volumes finitos para a solução das equações de conservação de massa, de quantidade de movimento, de espécies químicas e de energia. O processo de combustão utilizou um mecanismo com dois passos para verificação da formação de espécies químicas intermediárias juntamente com os modelos *Eddy Dissipation Concept* e *Finite Rate Chemistry* para o cálculo das taxas de reações químicas. A modelagem da turbulência foi empregada pelo modelo $k-\varepsilon$ padrão. Para o espectro de absorção e emissão dos gases de combustão na modelagem da transferência de calor por radiação foi utilizado o modelo de Soma Ponderada de Gases Cinza (WSGG) com coeficientes obtidos por Dorigon et al. (2013) acoplado ao Modelo de Transferência Discreta de radiação (DTRM).

O modelo de combustão de metano empregado é semelhante ao utilizado por Silva et al (2013) no seu trabalho de simulação numérica da câmara de combustão descrita por Garréton e Simonin (1994). A modelagem aqui implementada para prever o comportamento da combustão no interior do forno foi validada através de comparação com dados experimentais disponíveis na literatura e apresentados em Silva et al (2013), havendo boa convergência.

O modelo de combustão foi determinante para a verificação da temperatura dos tubos do forno estudado, bem como na troca de calor, que também depende da vazão e características do fluido a ser aquecido na serpentina de aquecimento do forno. Assim sendo a troca de calor que ocorre com os tubos do forno foi baseada nos efeitos da radiação e da convecção no meio

turbulento da câmara de combustão enquanto houvesse vazão de petróleo na serpentina de aquecimento, resultando em um coeficiente de troca térmica h à cada tubo, o qual foi adotado como condição de contorno para o problema. Este coeficiente foi determinado de forma separada do modelo numérico pelo software HTRI Xfh 6.0, que faz simulações do processo de fornos para o setor petroquímico baseado no método das zonas e em dados empíricos da operação destes equipamentos. O software utilizou as mesmas condições de contorno de vazões de ar e metano aplicadas ao modelo no CFX e também dados da curva TBP do petróleo Nigeriano Bonga, que possui grau API 29,4 cujos dados são disponíveis pela TOTSА.

Para avaliar a qualidade de malha, a relação entre os tamanhos representativos dos volumes de controle foi mantida constante em 1,3, ou seja, a malha menos refinada tem tamanho representativo 1,3 vezes maior do que a malha intermediária e esta 1,3 vezes maior do que a malha mais refinada. Esta relação obedece ao mínimo necessário para que se pudesse utilizar o método GCI para verificação da convergência de malha e identificar a incerteza entre malhas (Celik et al, 2008). Com o método GCI se verificou a convergência de malha para as temperaturas nas regiões dos tubos que estavam no mesmo plano de localização dos termopares que ficam a 0,4 m do centro do equipamento. Foi feita uma análise dos dados destas temperaturas no plano e calculados valores extrapolados que indicam uma boa convergência pela semelhança dos resultados encontrados para cada malha, com erro máximo encontrado de 6,86%. A análise GCI também mostrou que para os tubos do passe A a convergência mostrou-se oscilatória em 16,7% dos tubos do passe A e em 45,8% dos tubos do passe B.

Ainda dentro da análise GCI verificou-se que o erro numérico associado a temperatura dos tubos do passe B na região dos termopares nas simulações apresentou valor máximo de 1,66% pelo índice GCI, indicando uma convergência satisfatória das simulações apesar de haver 45,8% de convergência oscilatória. A mesma análise para as variáveis de concentração de NO e O₂ nos gases de saída mostrou índices GCI também satisfatórios, com incertezas numéricas máximas de 3,78% e 0,99% respectivamente. Todas as variáveis verificadas mostraram resultados muito próximos da faixa assintótica com valores de χ muito próximos a 1. A análise GCI mostrou que a malha mais refinada se mostrou adequada para a realização das simulações do modelo proposto.

A comparação entre os resultados encontrados para a temperatura na superfície dos tubos na simulação numérica com o modelo no CFX e com os encontrados pelo software HTRI Xfh revelou que o software Ansys CFX chegou a pontos com temperatura na média 15% maiores. A diferença pode ser atribuída a forma como cada software chegou ao resultado, o método das zonas divide o forno em regiões de tamanho bem maiores do que o que foi utilizado

no método dos volumes finitos, acarretando na verdade numa média de toda uma região. Desta maneira se verificou que o resultado numérico com o CFX pode ser mais interessante quando se busca pontos de sobreaquecimento na serpentina de aquecimento. Também se verifica que, com a utilização da ferramenta gráfica que o CFX possui, a identificação de sobreaquecimentos de superfícies é facilitada. A ferramenta gráfica possibilitou a identificação das linhas de velocidade no interior da câmara do forno que mostraram que há um fluxo de gases de combustão mais acentuado na região central do equipamento favorecendo a troca de calor por convecção, o que justifica as temperaturas mais elevadas nas superfícies dos tubos nestas áreas.

Assim como a temperatura dos tubos calculada mostrou-se maior no caso das simulações com o CFX, o fluxo de calor também calculado pelo CFX estava 12,5% maior no passe A e 10,9% maior no B do que o calculado pelo Xfh. Como ambos os softwares utilizaram o mesmo coeficiente de troca de calor, a diferença foi atribuída a maior temperatura exterior aos tubos que foi calculada pelo CFX e aos efeitos da radiação.

Os perfis de temperatura e de intensidade de radiação mostraram que há uma região de temperatura mais elevada na linha de centro da câmara de combustão, verificando-se também que no centro da simetria frontal este comportamento torna-se mais acentuado, o que é coerente com o perfil de temperatura dos tubos e também mostra a necessidade do posicionamento de termopares mais próximos ao centro do equipamento. Se verificou também que a fila de tubos dos passes incide a maior parte da radiação da chama, o que indica que para tubos acima desta região vão sofrer aquecimento praticamente por convecção dos gases de combustão.

A utilização de modelos que pudessem prever a formação de espécies químicas mostrou que mesmo com excesso de ar há uma pequena quantidade de CO nos gases da combustão assim como NO formado. Estes resultados não puderam ser contestados pelo HTRI Xfh já que o modelo empregado no mesmo não executou estes cálculos. Quanto a formação de CO₂ e H₂O, ambos os modelos apresentaram resultados aproximados, assim como o O₂ excedente e quantidade de N₂.

A comparação dos resultados encontrados para as temperaturas dos tubos nos dois modelos foi comparada aos dados do histórico operacional do forno real. A comparação apesar de limitada pela quantidade relativamente pequena de termopares no equipamento real, de apenas 4 para cada passe do forno, mostrou que os valores calculados pelos dois softwares estão muito próximos dos dados históricos. O Xfh conseguiu resultados mais próximos dos encontrados nas regiões de temperatura abaixo de 800 K com diferença máxima de 17,6%, enquanto que o modelo no CFX se mostrou mais adequado para a identificação das temperaturas mais elevadas e diferença máxima de 13,0%. Aqui além das diferenças de

modelagem é preciso também se atribuir erro devido à calibração dos sensores do equipamento, que não está em um laboratório com ambiente controlado e também a possíveis diferenças de vazão que podem ocorrer em cada passe do forno devido formação e incrustações de coque e mesmo a vaporização parcial do fluido no interior de cada tubo.

Finalmente, concluiu-se que a modelagem desenvolvida, um dos principais objetivos deste trabalho, em função dos resultados obtidos, se mostrou uma ferramenta muito eficaz para análise deste tipo de equipamento.

7.1 CONSIDERAÇÕES FINAIS

As análises dos resultados encontrados no trabalho demonstraram que o modelo apresenta resultados coerentes e satisfatórios quando comparados ao comportamento de forno real utilizado como base para a simulação. No entanto este trabalho ainda pode servir como base para o desenvolvimento de novos modelos cujos resultados podem ser mais acurados quando comparados até o desenvolvido até presente momento. Para dar continuidade ao estudo do comportamento de fornos de unidades de destilação atmosférica através de modelos numéricos os autores sugerem as seguintes propostas.

- Modelagem paralela do fluido nos tubos do equipamento, buscando determinar com mais precisão coeficientes de troca térmica e tornar o modelo independente de outros softwares.

- Emprego de diferentes condições de contorno, não baseadas em situações operacionais, mas buscando os limites do equipamento.

- Aplicação do modelo numérico em outros softwares comerciais como Ansys Fluent, COMSOL ou de código aberto como OpenFOAM.

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.
- Becher, V., Goanta, A., Spliethof, H., 2012. *Validation of spectral gas radiation models under oxyfuel conditions – Part C: Validation of simplified models*. International Journal of Greenhouse Gas Control, vol. 11, pp 34-51.
- Behrenbruch P. e Dedigama T., 2007. *Classification and Characterization of crude oils based on distillation properties*, J. Pet Sci. & Eng., vol. 57, pp. 166-180.
- Campos, M.C.M. de; Teixeira, H.C.G. *Controles Típicos de Equipamentos e Processos industriais*. 2a. ed. São Paulo: Blucher, 2010.
- Celik, I. B., Ghia, U., Roach, P.J., Freitas, C.J., Coleman, H., Raad, P.E., 2008. *Procedure for stimulation and reporting of uncertainty dual discretization in CFD applications*. ASME Journal of Fluid Engineering, vol. 130, pp. 078001-1 – 078001-4.
- Centeno, F. R., França, F.H.R., Cassol, F., Silva, C.V., 2012. *Evaluation of new WSGG model correlations on radiative source term in a 2d axisymmetric turbulent diffusion flame*. 14th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering. Rio de Janeiro – RJ.
- Centeno, F. R., França, F.H.R., Cassol, F., Silva, C.V., 2014. *The influence of gas radiation on the thermal behavior of a 2D axisymmetric turbulent non-premixed methane-air flame*. 1 Energy Conversion and Management, v. 79, p. 405-414.

Cui X., Li X. e Sui H. 2012. *Computational 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.

Dorigon, L.J., Duciak, G., Brittes, R.mCassol, F., Galarça, M., França, F.H.R., 2013. *WSGG correlations based on HITEMP 2010 for computation of thermal radiation in non-isothermal, non-homogeneous H₂O/CO₂ mixtures*. International Journal of Heat and Mass Transfer, vol. 64, pp. 863-873.

Eaton, A. M., Smoot, L. D., 1999, *Components, Formulations, Solutions, Evaluation and application of comprehensive combustion models*. Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 25, pp. 387-436.

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.

Garréton, D. e Simonin, O., 1994. *Final results. Aerodynamics and steady state combustion chamber and furnaces*, ECOFTAC Bulletin, pp. 29-38.

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.

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.

Hottel, H. C., Sarofim, A. F., 1967. *Radiative Transfer*, Ed. McGraw-Hill Book Company, New York, 520p.

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.

Isnard, A. A., Gomez, M. S. P., 1999. *Numerical simulation of the NO_x and CO formation in natural gas diffuse flame*. XV Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, Águas de Lindóia.

Jethva M. N. e Bhagchandani C. G., 2013. *Fired Heater Design and Simulation*. *International Journal of Engineering Trends and Technology*. Vol. 41, pp 159-164.

KUO, K. K., 2005. *Principles of Combustion*. 2 ed. Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons.

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 gas side for refining 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 Gas 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 Combustion - The Combustion Institute, pp.1405-1414.

Magel, H. C., Schnell, U., Hein, K.R.G., 1996. *Simulation of detailed chemistry in a turbulent combustor flow*. 26th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, pp 67-74.

Magnussen, 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.

Maliska, C. R., 2012. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*, 2^a edição, Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro, Brasil.

Nieckele, A. O., Naccache, M. F., Gomes, M. S. P., Carneiro, J. E. and Serfaty, R., 2002. *Predição da combustão de gás natural em uma fornalha utilizando reação em uma e duas etapas*. Conen, João Pessoa, PB.

Oakley, D. E., 2017. *Case Study: Using Xfh Ultra Increases Fired Heater Capacity | HTRI*. The Exchanger newsletter. Heat Transfer Research, Inc.

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.

Peters, N., 2006. *Turbulent Combustion*. Cambridge University Press.

Roache, P.J., 1994. *Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies*. ASME Journal of Fluid Engineering, pp 116-150.

Rothman, L. S., Gordon, I. E., Barber, R. J., Dothe, H., Gamache, R. R., Goldman, A., Perelov, V. I., Tashkun, S. A., Tennyson, J., 2010. *HITEMP, the high-temperature molecular*

spectroscopic database. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, vol. 111, pp. 2130-2150.

Siegel, R. e Howell, J. R., 2002. *Thermal Radiation Heat Transfer*, 4th end, Taylor & Francis, New York – London.

Silva, C.V., Segatto, C.A., Paula, A.V., Centeno, F.R., França, F.H.R., 2013. *3D analysis of turbulent non-premixed combustion of natural gas in a horizontal cylindrical chamber*. 22th Brazilian Congress of Mechanical Engineering, Ribeirão Preto – SP, Brasil.

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.

Turns, S.R., 2000, *An introduction to combustion: concepts and applications*, McGraw-Hill.

Veynante, D. e Verisch, L., 20002. *Turbulent combustion modeling*. Progress in Energy and Combustion Science, vol. 28, pp. 193-266.

Vinayagam, K., 2007. *Understand the secrets of fired heaters tuning*. Hydrocarbon Processing.

Warnatz, J., Maas, 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.

<<https://www.htri.net/xfh>> acessado em 06 de nov. de 2017.