

## **MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE UM REATOR DE CLORAÇÃO DE ETENO PARA PRODUÇÃO DE EDC**

Angela Lucínia Urtiga Vasconcelos, [angelalucinia@yahoo.com.br](mailto:angelalucinia@yahoo.com.br)<sup>1</sup>

José Jailson Nicácio Alves, [jailson@deq.ufcg.edu.br](mailto:jailson@deq.ufcg.edu.br)<sup>1</sup>

Luis Gonzaga Sales Vasconcelos, [vasco@deq.ufcg.edu.br](mailto:vasco@deq.ufcg.edu.br)<sup>1</sup>

Romildo Pereira Brito, [romildo.brito@deq.ufcg.edu.br](mailto:romildo.brito@deq.ufcg.edu.br)<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidade Federal de Campina Grande, Rua Aprígio Veloso, 882, Bairro Universitário

**Resumo:** Este trabalho teve por objetivo aplicar técnicas da Fluidodinâmica Computacional (CFD) na simulação de um Reator de Cloração de Eteno para produção de Dicloroetano (EDC) utilizado na indústria de produção de polímeros no sentido de obter-se um melhor rendimento do processo e minimizar a perda de eteno não reagido no topo do reator. A modelagem do reator foi realizada através dos softwares comerciais ANSYS-Workbench e ANSYS-CFX 11.0 utilizando como método de discretização das equações diferenciais a técnica dos volumes finitos. A análise dos resultados foi realizada através de dados obtidos a partir da técnica do Planejamento Fatorial onde foi possível definir as novas condições operacionais para o reator bem como direcionar para a modificação da geometria dos distribuidores de eteno quanto ao número de furos, ao diâmetro dos furos e a posição dos furos em relação ao eixo central dos distribuidores. O modelo foi testado em várias configurações através de um estudo de caso, usando o reator de cloração de eteno da Unidade de Cloro-Soda da BRASKEM, localizada em Maceió, Brasil, obtendo resultado satisfatório.

**Palavras-chave:** Fluidodinâmica Computacional, Reator, Simulação Numérica, EDC, Eteno

### **1. INTRODUÇÃO**

Quando não se dispõe de um modelo matemático validado de determinado equipamento, como é o caso do reator de coluna de bolhas de  $C_2H_4Cl_2$  da BRASKEM, a operação é basicamente realizada com base no julgamento de engenharia, ou seja, na experiência adquirida ao longo dos anos de operação, através da análise dos sintomas e efeitos de cada modificação sobre o processo. No caso do reator de coluna de bolhas de  $C_2H_4Cl_2$  da BRASKEM, cada alteração realizada pode acarretar em perdas de produtividade e/ou Qualidade do produto final.

A disponibilidade do processo de cozimento totalmente modelado teoricamente, com a análise dos efeitos de cada parâmetro de processo conhecidos conjunta e isoladamente, faz com que o resultado de uma modificação operacional seja previamente conhecido: fração volumétrica do gás, fluxo de velocidade em cada fase, etc. O resultado final é a redução dos efeitos negativos que essas alterações poderiam trazer quando feitas de maneira empírica, assim elas permitem a identificação de oportunidades para obtenção de melhor rendimento do processo.

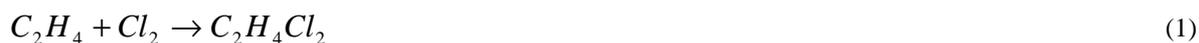
### **2. CARACTERIZAÇÃO DO PROBLEMA**

Atualmente durante o Processo de Cloração de Eteno nos Reactores de EDC que é utilizado na indústria de produção de polímeros, verifica-se que existe a perda de eteno não reagido no topo do reator..

Alterações da geometria dos distribuidores de eteno como o número de furos dos distribuidores, o diâmetro dos furos e a posição dos furos em relação ao eixo central podem ser variados de forma a obter-se um melhor rendimento do processo e minimizar a perda de eteno não reagido. Neste trabalho, estas variações serão feitas via simulação numérica.

### **3. DESCRIÇÃO DO PROCESSO DE OBTENÇÃO DO EDC**

A maioria das tecnologias que foram desenvolvidas para obtenção do monômero cloreto de vinila faz uso de um processo a partir de eteno ( $C_2H_4$ ) e cloro ( $Cl_2$ ), onde a reação de cloração direta de eteno é empregada para produzir 1,2-dicloroetano (EDC).



A reação de cloração direta de eteno ocorre no reator de EDC no qual está acoplado um trocador de calor montado na vertical.

O reator consiste de um tubo cilíndrico vertical em aço carbono com 13,5m de altura e 1,70m de diâmetro, que se comunica com o trocador de calor, de cascos e tubos, através do topo do reator, na parte superior, e pelo “U” de reação na parte inferior como mostrado na Fig. (1).

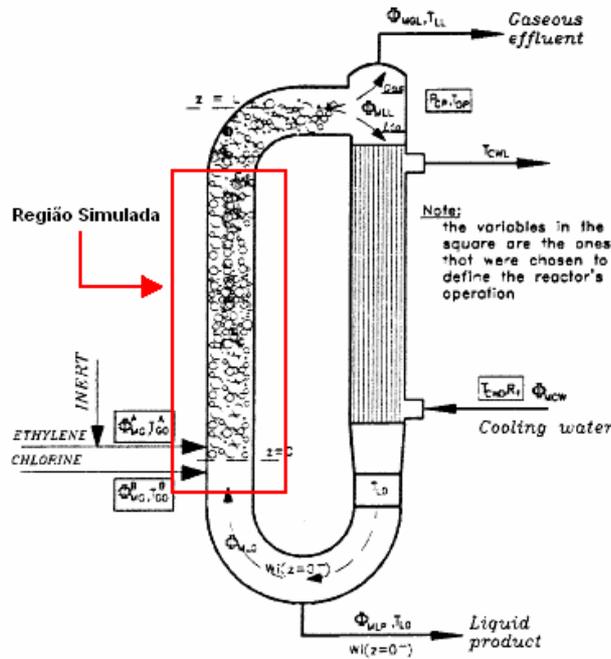


Figura 1. Esquema do reator de bolhas.

Com a finalidade de facilitar o contato entre o cloro, o eteno e o catalisador é necessário que antes de entrar e operação todo o sistema reator e trocador de calor estejam cheios de EDC líquido até nível normal de operação. A massa líquida circula continuamente entre o reator e o trocador de calor não sendo necessário bombeamento mecânico pois tal circulação tem como agente propulsor o efeito termosifão formado pela diferença de temperatura e conseqüente diferença de densidade entre a parte mais quente (mais leve) e a mais fria (mais pesada).

A reação ocorre através da cloração direta do eteno petroquímico, a baixa temperatura e pressão, sendo o cloro alimentado no estado líquido e o eteno no estado gasoso.

O cloro entra no sistema de reação pela parte horizontal do “U” de reação, e o eteno pela parte vertical “perna de reação”.

A reação de adição de cloro no eteno é catalisada por cloreto férrico anidro ( $FeCl_3$ ). O cloro entra no reator através de 5 espargidores de 3” de diâmetro contendo um total de 298 furos de 8 mm de diâmetro orientados em co-corrente ao fluxo do reator.

A entrada de eteno no reator é feita através de 3 espargidores de 4” de diâmetro que contém um total de 204 furos de 6 mm de diâmetro distribuídos uniformemente e orientados no mesmo sentido do fluxo de massa circulante de EDC.

Neste trabalho não foi considerada a reação química, apenas a dissolução do eteno ( $C_2H_4$ ) e cloro ( $Cl_2$ ) no EDC ( $C_2H_4Cl_2$ ). O reator em questão tem capacidade de  $19\text{ m}^3$  e capacidade de produção de 54000 ton de EDC ( $C_2H_4Cl_2$ ) por ano. As simulações foram feitas apenas na região heterogênea destacada em vermelho na Fig. (1).

#### 4. MODELO FÍSICO

As simulações foram feitas apenas na região heterogênea, perna de reação, destacada em vermelho na Fig. (1). Portanto, conforme informações passadas pela BRASKEM as características geométricas da perna de reação do Reator de EDC são as seguintes:

- Diâmetro do Reator de EDC = 1,7 m
- Altura do Reator de EDC = 13,5 m
- Diâmetro dos espargidores de Eteno = 0,1016 m
- Distância entre os espargidores = 0,37 m
- Número de furos em cada distribuidor = 68

- Diâmetro dos furos = 0,006 m
- Direção em relação ao eixo = 20°

A construção da geometria do Reator de Cloração de Eteno (Domínio Computacional Tridimensional) foi feita no software ANSYS Workbench.

A Figura (2) mostra a geometria do Reator de Cloração de Eteno usada nas simulações. Para diminuir o tempo de simulação foi considerada a simetria do reator.

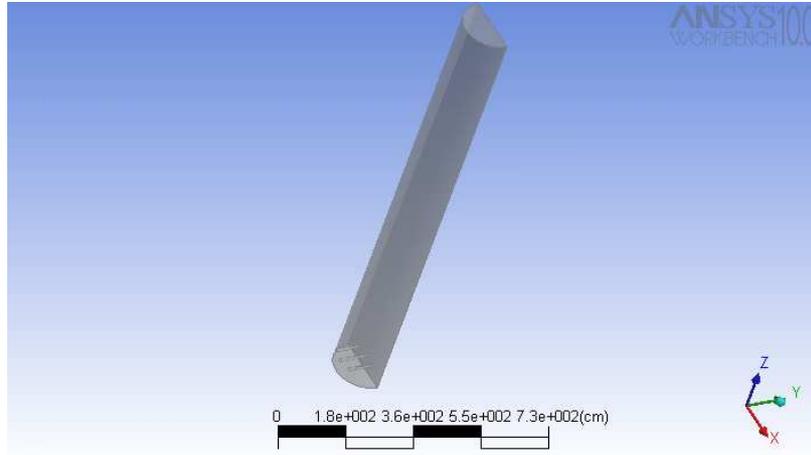


Figura 2. Geometria do Reator de Cloração de Eteno.

## 5. MODELAGEM MATEMÁTICA

A modelagem da coluna de bolhas de  $C_2H_4Cl_2$  da BRASKEM baseia-se na aplicação dos princípios de conservação da massa, energia e quantidade de movimento e está sendo desenvolvida usando fluidodinâmica computacional (CFD).

O modelo matemático baseia-se nas equações de conservação da quantidade de movimento e da massa para cada fase no reator. O processo foi considerado isotérmico.

A Equação (2) representa a quantidade de movimento.

$$(2) \quad \frac{\partial [f_\alpha \rho_\alpha \vec{v}_\alpha]}{\partial t} + \nabla \cdot [f_\alpha (\rho_\alpha \vec{v}_\alpha \vec{v}_\alpha - \mu_{eff\alpha} (\nabla \vec{v}_\alpha + \nabla \vec{v}_\alpha^T))] = f_\alpha (\rho \vec{g} - \nabla P) + \beta (\vec{v}_\phi - \vec{v}_\alpha)$$

Onde  $v$  é velocidade,  $P$  é a pressão,  $\rho$  é a densidade,  $\mu_{eff}$  é a viscosidade efetiva do meio e  $f$  é a fração volumétrica. O subscrito  $\alpha$  identifica a fase no reator. Quando  $\alpha$  = fase líquida,  $\phi$  = fase gasosa e vice-versa.

A Equação (3) representa a continuidade para a fase  $\alpha$ .

$$\frac{\partial [f_\alpha \rho_\alpha]}{\partial t} + \nabla \cdot [f_\alpha \rho_\alpha \vec{v}_\alpha] = R_\alpha \quad (3)$$

$R$  é a taxa de formação da fase  $\alpha$ .  $R$  é positivo para a fase líquida (EDC) e negativa para a fase gasosa (eteno), pois a transferência de massa é do gás para o líquido.

A Equação (4) representa a energia cinética turbulenta para a fase líquida.

$$\frac{\partial [f_L \rho_L \varepsilon]}{\partial t} + \nabla \cdot [f_L \vec{v}_L \rho_L \varepsilon - f_L D_{\varepsilon_L}^{eff} \nabla \rho_L \varepsilon] = f_L G_K \quad (4)$$

Onde  $\varepsilon$  é a energia cinética turbulenta do líquido,  $D_{\varepsilon_L}^{eff}$  é o coeficiente de difusão da energia cinética turbulenta e  $G_K$  taxa de geração de energia cinética turbulenta no líquido.

A Equação (5) representa a taxa de dissipação da fase contínua (líquida).

$$\frac{\partial [f_L \rho_L T_\varepsilon]}{\partial t} + \nabla \cdot [f_L \vec{v}_L \rho_L T_\varepsilon - f_L D_{T_\varepsilon L}^{eff} \nabla \rho_L T_\varepsilon] = f_L G_{TK} \quad (5)$$

Onde  $T_E$  é a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta do líquido,  $D_{T_{Eu}}^{eff}$  é o coeficiente de difusão da taxa de dissipação de energia cinética turbulenta e  $G_{Tk}$  é o termo fonte da taxa de dissipação de energia cinética turbulenta no líquido.

Os modelos de turbulência adotados foram o k- $\epsilon$  para a fase contínua e zero equation para a fase dispersa.

A malha computacional empregada foi do tipo estruturada com 33602 nós e 111992 elementos.

O critério de convergência dos resíduos adotado foi de  $10^{-4}$ .

## 6. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nas simulações utilizou-se o sistema bifásico EDC-Eteno, sendo o EDC (Dicloroetano) a fase contínua e o Eteno a fase dispersa.

As propriedades físico-químicas das substâncias utilizadas estão dispostas na Tab (1).

**Tabela 1. Propriedades dos Fluidos a 25°C.**

	EDC	Eteno
Massa Específica [kg/m <sup>3</sup> ]	1253	1,178
Viscosidade [Pa s]	0,0008	$1,14 \times 10^{-15}$
Tensão Interfacial [N/m]	0,038	

### 6.1. Condições de Contorno

A simulação foi configurada para o regime permanente devido as suas características de funcionamento contínuo na sua operação na planta industrial.

As condições de contorno estão dispostas na Tab (2).

**Tabela 2. Condições de Contorno.**

Local	Tipo	Especificações
Base da Coluna	Entrada de EDC	Vazão de EDC = 1626,38 Kg/s
		Fração Volumétrica de EDC = 1
		Fração Volumétrica de Eteno = 0
Espargidores	Entrada de Eteno	Vazão de Eteno = 1,4056 Kg/s
		Fração Volumétrica de EDC = 0
		Fração Volumétrica de Eteno = 1
Topo da Coluna	Saída	Pressão Relativa = 0 Pa
Parede	Parede Lisa	Condição de não escorregamento

### 6.2. Planejamento Fatorial 2<sup>3</sup>

O Planejamento Fatorial foi utilizado neste trabalho, pois os efeitos das variáveis individuais e suas combinações sobre a fração volumétrica de eteno no topo do reator foram investigados. O Planejamento Fatorial adotado foi o 2<sup>3</sup> que tem três fatores cada em dois níveis. Os três fatores utilizados foram o número de furos de cada espargidor, o diâmetro dos furos e a posição dos furos em relação ao eixo central

A Tabela (3) mostra os valores das variáveis de interesse consideradas na simulação em três níveis.

As simulações foram realizadas, seguindo o planejamento fatorial mostrado na Tab (4).

**Tabela 3. Variáveis do planejamento fatorial.**

Variáveis	Nível -1	Nível 0	Nível +1
Nº de furos	54	68	82
Diâmetro (cm)	0,48	0,6	0,72
Posição	16°	20°	24°

Tabela 4. Planejamento Fatorial.

Experimento	A (Nº de furos)	B (Diâmetro)	C (Posição)
1	-1	-1	-1
2	+1	-1	-1
3	-1	+1	-1
4	-1	-1	+1
5	+1	+1	-1
6	-1	+1	+1
7	+1	-1	+1
8	+1	+1	+1
9	0	0	0

### 6.3. Resultados dos Experimentos

As Figura (3) representa o perfil da fração volumétrica de eteno com as condições atuais, ou seja, sem nenhuma modificação, o experimento 9 do Planejamento Fatorial. A Figura (4) mostra o perfil da velocidade superficial de EDC do Experimento 9 do Planejamento Fatorial.

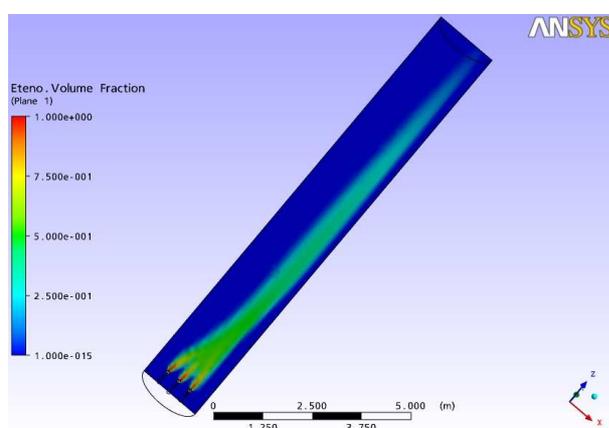


Figura 3. Fração Volumétrica de Eteno do experimento 9.

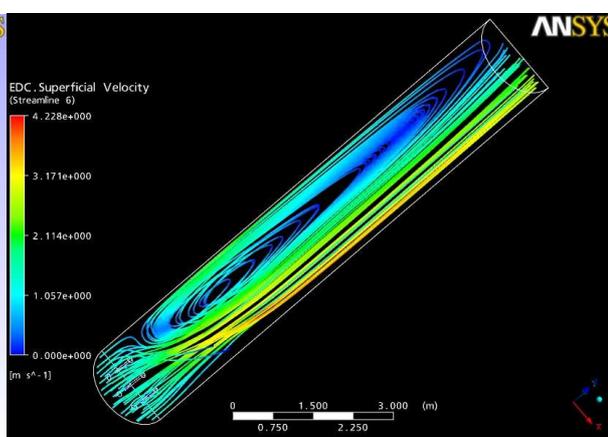


Figura 4. Linhas de Corrente do EDC para o experimento 9.

Para o experimento 9 a fração volumétrica no topo do reator é a seguinte:  $X_{topo}(9) = 0,00247637$

#### 6.3.1. Experimento 1

A Figura (5) mostra o resultado da fração volumétrica de eteno para o Experimento 1 do planejamento fatorial. A Figura (6) mostra o perfil da velocidade superficial de EDC do Experimento 1 do Planejamento Fatorial.

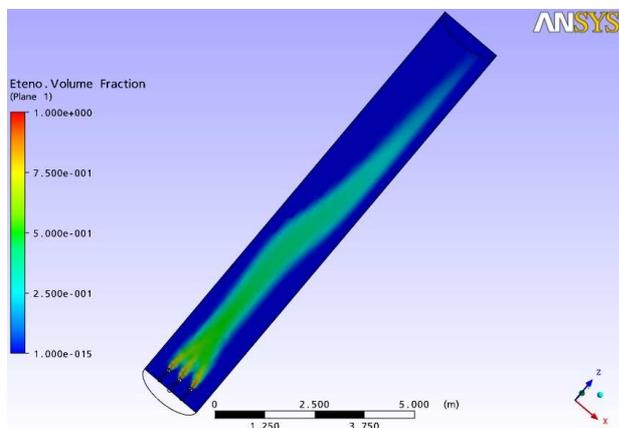


Figura 5. Fração Volumétrica de Eteno do experimento 1

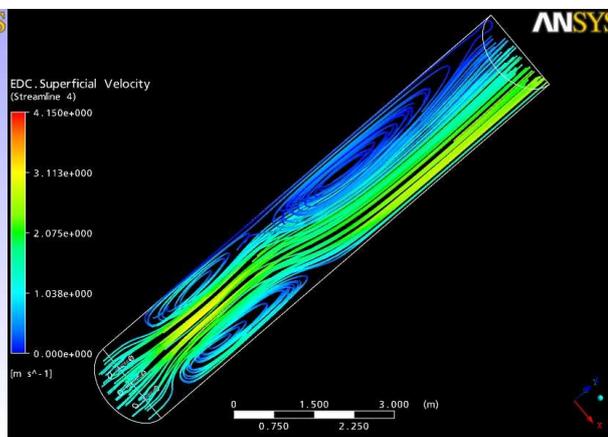


Figura 6. Linhas de Corrente do EDC para o experimento 1.

Para o Experimento 1 a fração volumétrica no topo do reator foi a seguinte:

$$X_{topo}(1) = 1 \times 10^{-15}$$

### 6.3.2. Experimentos 2 e 4

A Figura (7) mostra o resultado da fração volumétrica de eteno para o Experimento 2 do planejamento fatorial. A Figura (8) mostra o resultado da fração volumétrica de eteno para o Experimento 4 do planejamento fatorial

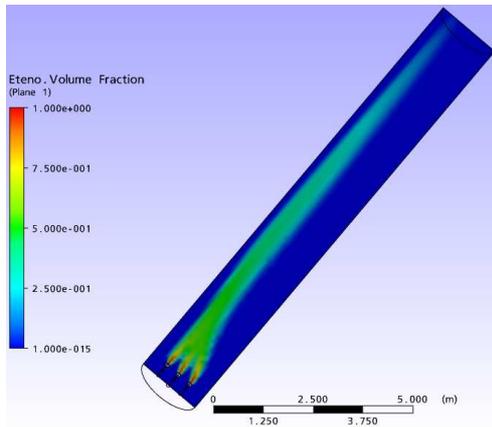


Figura 7. Fração Volumétrica de Eteno do experimento 2.

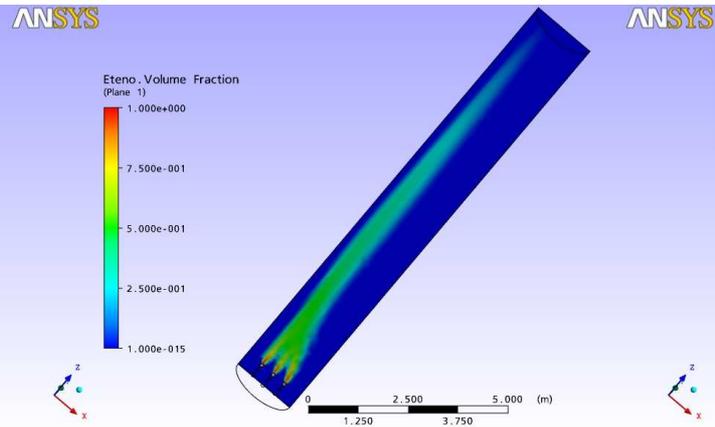


Figura 8. Fração Volumétrica de Eteno do experimento 4.

Para o Experimentos 2 e 4 as frações volumétrica no topo do reator foram as seguintes:

$$X_{topo}(2) = 0,00270 \text{ e } X_{topo}(4) = 0,00063$$

### 6.3.3. Experimento 6 e 8

A Figura (9) mostra o resultado da fração volumétrica de eteno para o Experimento 6 do planejamento fatorial. A Figura (10) mostra o resultado da fração volumétrica de eteno para o Experimento 8 do planejamento fatorial

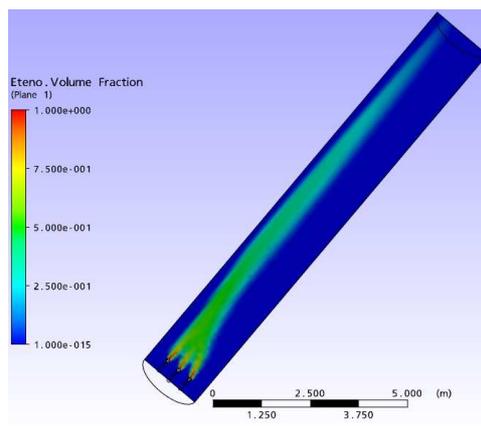


Figura 9. Fração Volumétrica de Eteno do experimento 6.

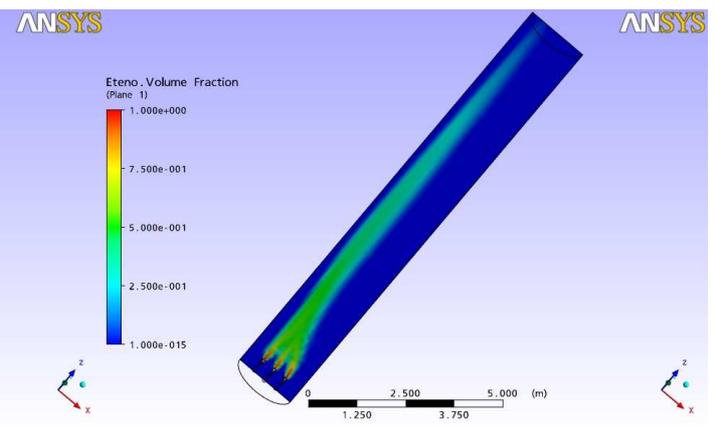


Figura 10. Fração Volumétrica de Eteno do experimento 8.

Para o Experimentos 6 e 8 as frações volumétrica no topo do reator foram as seguintes:

$$X_{topo}(6) = 0,00277 \text{ e } X_{topo}(8) = 0,00330$$

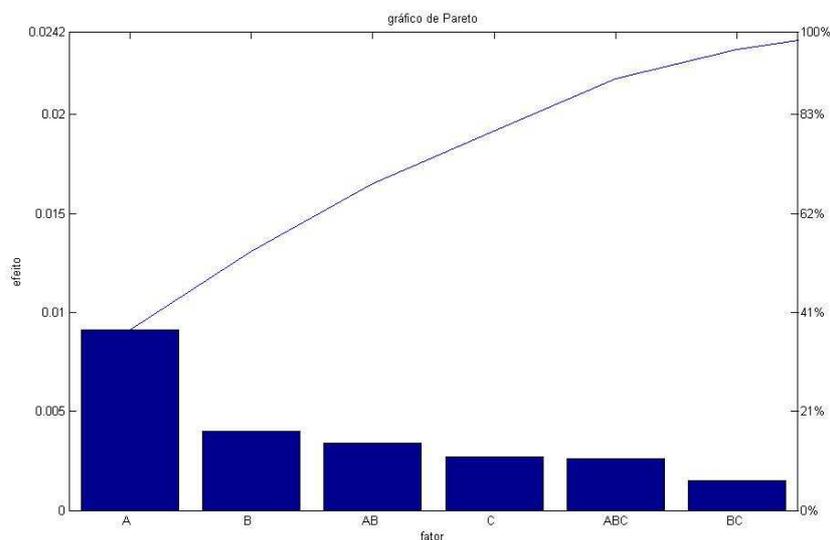
#### 6.4. Análises dos Resultados

Com base na Tab (4) e nos resultados dos experimentos de 1 a 8 , calculou-se os efeitos de cada variável e suas interações. A Tabela (5) mostra a matriz dos coeficientes de contraste de um fatorial  $2^3$  contendo uma coluna  $X_{\text{topo}}$  com as respostas da fração volumétrica de eteno no topo do reator.

**Tabela 5. Coeficientes de contraste para um fatorial  $2^3$ .**

	A	B	C	AB	AC	BC	ABC	$X_{\text{topo}}$
1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	$1 \times 10^{-15}$
2	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	0,00270
3	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	0,00158
4	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	0,00063
5	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	0,00388
6	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	0,00277
7	+1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	0,00418
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	0,00330

A Figura (11) mostra o gráfico de Pareto do efeito em ordem de significância independentemente se o efeito é positivo ou negativo.



**Figura 11. Gráfico de Pareto.**

De acordo com o gráfico de Pareto o fator A, que representa a variável número de furos, é o fator de maior significância, seguido do fator B, diâmetro dos furos, da interação AB, do fator C, que representa a posição, da interação ABC, da interação BC e por último da interação AC que apresenta a menor significância.

Observa-se no gráfico de Pareto que não só os fatores independentes, mas suas interações são extremamente importantes, dificultando a análise dos efeitos das variáveis individuais. Podia-se esperar pelo gráfico de Pareto que a diminuição do fator A, número de furos, diminuísse a fração volumétrica de Eteno no topo do reator embora isto não tenha sido verificado na simulação como pode ser observado na Fig (12) e (13), onde a fração volumétrica de eteno no topo foi de:

$$X_{\text{topo}} = 0,01232$$

Muito alto em relação ao caso base (experimento 9) que foi de:

$$X_{\text{topo}}(9) = 0,00247637$$

Possivelmente o Fator A, número de furos depende da interação com outros fatores não considerados neste trabalho.

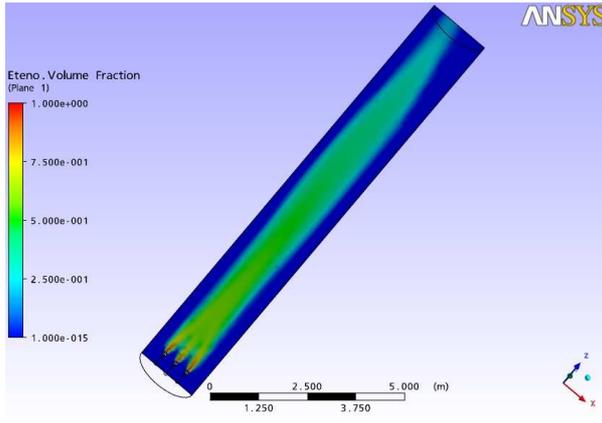


Figura 12. Fração Volumétrica de Etano para número de furos 20% menor

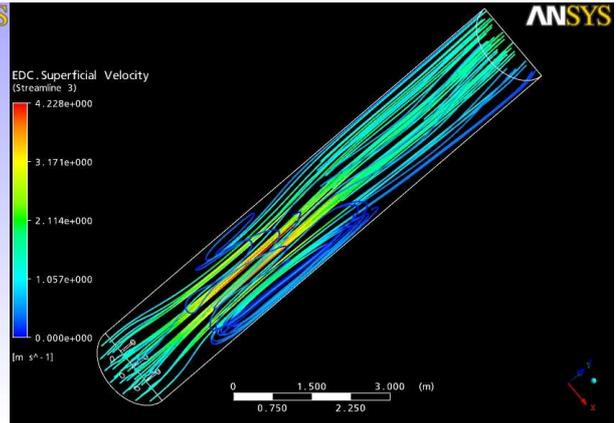


Figura 13. Linhas de Corrente do EDC para número de furos 20% menor

O perfil da velocidade superficial de EDC observado na Fig (3) mostra que nestas condições não existe nenhuma zona de circulação de EDC significativa o que possivelmente diminui o fator de mistura entre as fases e conseqüentemente a transferência de massa.

Observa-se na Tab (5) que os experimentos 1, 3 e 4 apresentaram bons resultados com relação a fração volumétrica de etano no topo do reator, podendo ser três soluções para o problema em questão.

Através da análise da Tab (5) foram realizadas mais duas simulações alterando alguns fatores no caso base. Na primeira simulação diminuiu-se o diâmetro dos furos dos espargidores em 20% em relação ao caso base ( $D = 0,48$  cm). As Figuras (14) e (15) mostram o resultado.

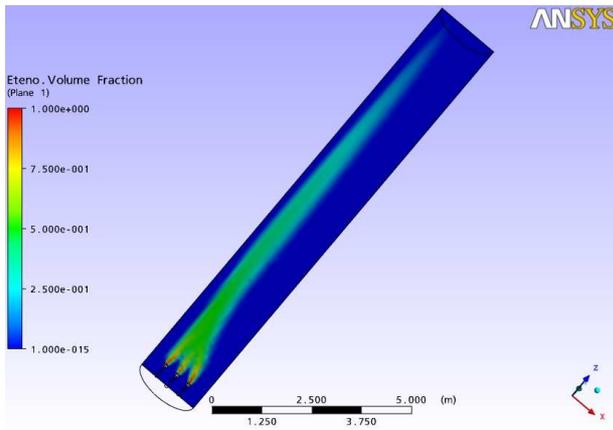


Figura 14. Fração Volumétrica de Etano com o diâmetro 20% menor.

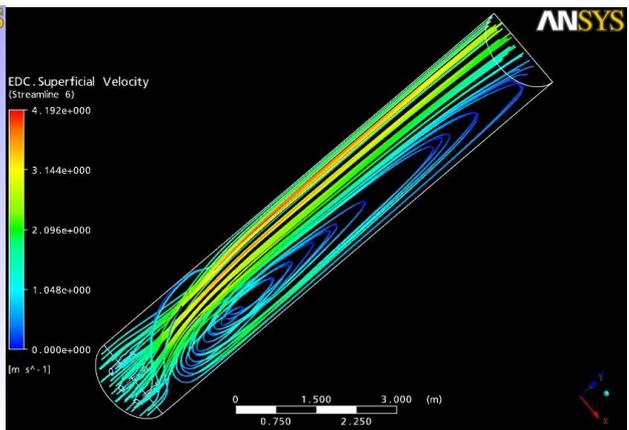


Figura 15. Linhas de Corrente do EDC para diâmetro 20% menor.

A fração volumétrica no topo do reator foi a seguinte:

$$X_{topo} = 0,00108$$

Comparando-se o experimento 7, que possui o maior valor de fração volumétrica no topo do reator, com o experimento 1, que possui o menor valor, tem-se que a diferença entre os experimentos é o diâmetro e a posição. Portanto, na segunda simulação diminuíram-se o diâmetro dos furos e a posição em 20% em relação ao caso base ( $D = 0,48$  cm, Posição =  $16^\circ$ ). As Figuras (16) e (17) mostram o resultado.

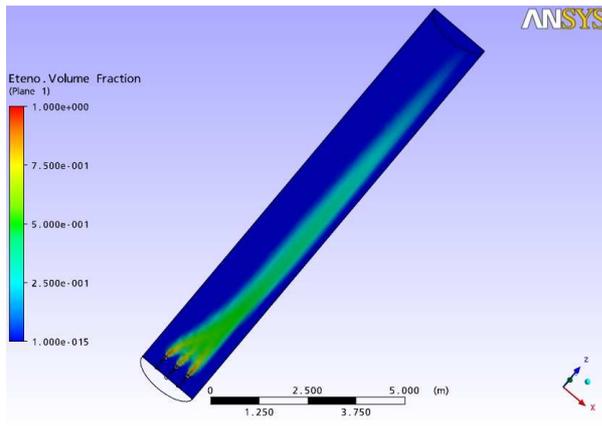


Figura 16. Fração Volumétrica de Eteno com diâmetro dos furos e a posição 20% menor.

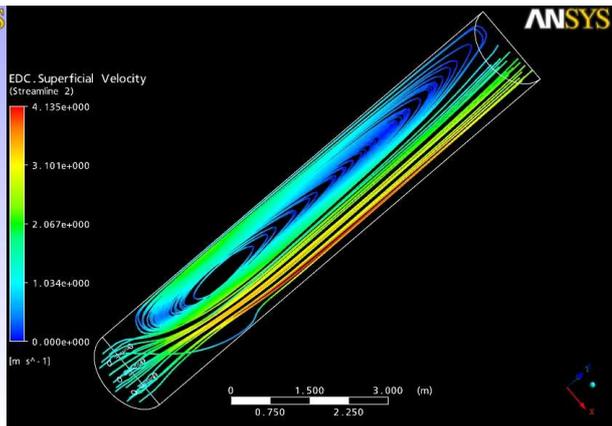


Figura 17. Linhas de Corrente do EDC para o diâmetro dos furos e a posição 20% menores.

A fração volumétrica no topo do reator foi a seguinte:

$$X_{topo} = 0,00059$$

Em quase todas as simulações o perfil de velocidade superficial de EDC apresenta uma zona de circulação de líquido, no caso EDC, indicando que a vazão de EDC tem uma grande contribuição nos perfis de fração volumétrica apresentados. Portanto, a partir desta análise foi realizada mais uma simulação considerando o caso base, diminuindo apenas a vazão de EDC em 20% em relação ao caso base (Vazão EDC = 1301.104 kg/s). As Figuras (18) e (19) apresentam estes resultados.

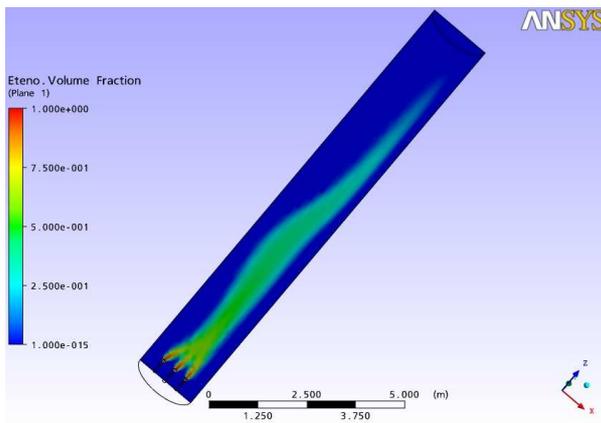


Figura (18). Fração Volumétrica de Eteno com a vazão de EDC 20% menor.

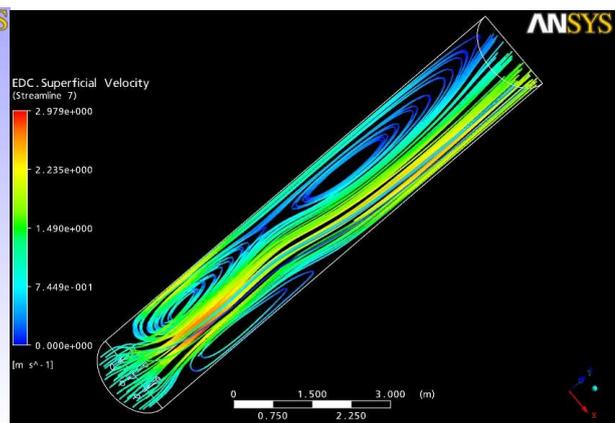


Figura (19). Linhas de Corrente do EDC para vazão de EDC 20% menor.

A fração volumétrica no topo do reator foi a seguinte:

$$X_{topo} = 1 \times 10^{-15}$$

Avaliando-se todos os resultados e comparando-os ao caso base, experimento 9, tem-se que as mudanças a serem realizadas com o objetivo de diminuir a perda de eteno no topo do reator estão representadas na Tab (6).

**Tabela 6. Mudanças a serem realizadas e seus respectivos efeitos.**

<b>Mudança</b>	<b>Efeito</b>
Diâmetro dos furos dos espargidores 20 % menor (D = 0,48 cm)	Redução de 56,45% da fração volumétrica de eteno no topo do Reator
Número de Furos, Diâmetro e Posição 20% menores.	Redução de 100% da fração volumétrica de eteno no topo do Reator
Número de Furos e Posição 20% menores e Diâmetro 20% maior.	Redução de 36,29% da fração volumétrica de eteno no topo do Reator
Número de Furos e Diâmetro 20% menores e Posição 20% maior.	Redução de 74,60% da fração volumétrica de eteno no topo do Reator
Número de Furos e Posição 20% menores	Redução de 76,21% da fração volumétrica de eteno no topo do Reator
Vazão de EDC 20% menor	Redução de 100% da fração volumétrica de eteno no topo do Reator

O experimento 1 em que o número de furos, o diâmetro e a posição foram diminuídos em 20% em relação ao caso base e a simulação em que a vazão de EDC foi diminuída em 20% em relação ao caso base apresentaram os melhores resultados com uma redução de 100% da fração volumétrica de eteno no topo do reator, em ambas simulações os perfis de velocidade superficial de EDC apresentaram pequenas zonas de circulação diferentemente das apresentadas nas outras simulações em que o perfil de velocidade superficial de EDC apresentou uma única e grande zona de circulação de EDC

## 7. CONCLUSÕES

A Fluidodinâmica Computacional é uma ótima ferramenta para modelagem e otimização de equipamentos ou processos em que experimentação é difícil ou dispendiosa como é o caso do Reator de Cloração de Eteno da BRASKEM.

Como pode ser visto nas simulações a geometria dos espargidores de Eteno tem uma grande parcela de influência no modo de operação de um Reator do tipo Coluna de Bolhas uma vez que determina o tamanho inicial das bolhas na coluna.

Em praticamente todas as simulações foi verificado que a pluma de eteno apresentou um caminho preferencial ao longo do reator e que este perfil é influenciado tanto pelas características geométricas dos espargidores quanto pela vazão de EDC.

Os melhores resultados foram observados nas simulações em que o perfil de velocidade superficial de EDC apresentou pequenas zonas de circulação diferentemente das apresentadas nas outras simulações em que o perfil de velocidade superficial de EDC apresentou uma única e grande zona de circulação de EDC ou da simulação em que não existia praticamente nenhuma zona de circulação.

## 8. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem a BRASKEM pelas informações e suporte técnico.

## 9. REFERÊNCIAS

- Deckwer, W.D., 1992, "Bubble Column Reactors". Chichester: John Wiley & Sons Ltd., 532 p.
- Forret, A., Schweitzer, J. M., Gauthier, T., Krishna, R and Schweich, D., 2003, "Influence of scale on the hydrodynamics of bubble column reactors: an experimental study in columns of 0.1, 0.4 and 1m diameters", Chemical Engineering Science Vol. 58, p. 719 – 724.
- Manual de Operação do Programa CFX 11.0
- Monografia de Processo da área de DCE da Braskem SA.
- Orejas, J. A., 1999, "Modelling and Simulation of a Bubble-column Reactor with External Loop: Application to Direct Chlorination of Ethylene", Chemical Engineering Science, Elsevier, p.p. 5299-5309.
- Orejas, J. A., 2001, "Model Evaluation for an Industrial Process of Direct Chlorination of Ethylene in a Bubble-column Reactor with External Recirculation Loop", Chemical Engineering Science, Elsevier, p.p. 513-522.
- Wild, G., Poncin, S., Li, H., Olmos, E., 2003, "Some Aspects of the Hydrodynamics of Bubble Columns", International Journal Of Chemical Reactor Engineering, Vol.1 Review R7.

## 10. DIREITOS AUTORAIS

De domínio público.



COMPROMETIDA COM A PROMOÇÃO DO DESENVOLVIMENTO  
DA ENGENHARIA E DAS CIÊNCIAS MECÂNICAS

**VI CONGRESSO NACIONAL DE ENGENHARIA MECÂNICA**  
**VI NATIONAL CONGRESS OF MECHANICAL ENGINEERING**  
**18 a 21 de agosto de 2010 – Campina Grande – Paraíba - Brasil**  
*August 18 – 21, 2010 – Campina Grande – Paraíba – Brazil*

## **MODELING AND SIMULATION OF A REACTOR FOR CHLORINATION OF ETHYLENE TO PRODUCE EDC**

Angela Lucínia Urtiga Vasconcelos, [angelalucinia@yahoo.com.br](mailto:angelalucinia@yahoo.com.br)<sup>1</sup>

José Jailson Nicácio Alves, [jailson@deq.ufcg.edu.br](mailto:jailson@deq.ufcg.edu.br)<sup>1</sup>

Luis Gonzaga Sales Vasconcelos, [vasco@deq.ufcg.edu.br](mailto:vasco@deq.ufcg.edu.br)<sup>1</sup>

Romildo Pereira Brito, [romildo.brito@deq.ufcg.edu.br](mailto:romildo.brito@deq.ufcg.edu.br)<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidade Federal de Campina Grande, Rua Aprígio Veloso, 882, Bairro Universitário

**Abstract.** *This work has an objective to apply techniques of computational fluid dynamics (CFD) to simulate a reactor for chlorination of ethylene to produce EDC used in industry for produce of polymers to obtain a better process efficiency and minimize loss of unreacted ethylene at the top of reactor. The modeling of the reactor was carried out using commercial software, ANSYS Workbench and ANSYS CFX-11.0 using a method of discretization of differential equations of the finite volume technique. The analysis was performed using data obtained from the factorial design technique it was possible to define the new operating conditions for the reactor as well as guide for modifying the geometry of the distribution of ethylene in the number of holes, the diameter of the holes and the position of holes in relation to the central axis of the distributors. The model was tested in various configurations through a case study using the reactor for chlorination of ethylene Unit Chlor-Alkali BRASKEM, located in Maceio, Brazil, obtaining satisfactory results.*

**Keywords:** *Computational Fluid Dynamics, Reactor, Numerical Simulation, EDC, Ethylene*