

## SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA FLUIDODINÂMICA DE UM RISER DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO

Fabio Pereira dos Santos, Ricardo A. Medronho

Escola de Química/UFRJ, Centro de Tecnologia, Bloco E, Ilha do Fundão, 21949-900 Rio de Janeiro-RJ,  
medronho@eq.ufrj.br

O processo em leito catalítico fluidizado (FCC-*Fluid Catalytic Cracking*) tem um papel importante na indústria do refino de petróleo, principalmente em países, como o Brasil, que têm que craquear petróleos pesados de cadeia longa. Os equipamentos básicos que compõem esse tipo de unidade são o reator, o *riser*, os ciclones e o regenerador; porém, é no *riser* onde ocorrem a maior parte das reações de craqueamento catalítico. Este é o motivo do grande interesse em compreender mais detalhadamente o comportamento do escoamento nessa região. A fluidodinâmica computacional (CFD) é uma ferramenta poderosa e com aplicação em praticamente todos os ramos da engenharia química. Suas vantagens estão relacionadas ao fato de que ela permite investigar o escoamento de fluidos dentro dos equipamentos empregados em processos químicos, sem as desvantagens de custo e tempo relacionadas à realização de experimentos laboratoriais. Neste trabalho, foram realizadas simulações numéricas do escoamento bifásico (catalisador e gasóleo) através de um *riser*, empregando o pacote comercial de fluidodinâmica computacional CFX 11.0. O modelo de turbulência adotado foi o k- $\epsilon$  para a fase fluida e um modelo de teoria cinética granular para determinar a viscosidade da fase particulada, já que foi adotada uma abordagem euleriana para modelagem da fase sólida. Foram empregadas condições de contorno reais de unidades de craqueamento catalítico de refinaria. Com base nas simulações, foi possível estudar-se os perfis de velocidade, concentração e pressão no *riser* e obter resultados em acordo com os existentes na literatura, mostrando, assim, que a modelagem utilizada foi satisfatória para avaliar a física do problema bifásico em um *riser* de FCC.

*Fluidodinâmica computacional, simulação numérica, CFD, Riser, FCC, leito fluidizado, catalisador.*

### 1. INTRODUÇÃO

Fluidodinâmica computacional (CFD - *computational fluid dynamics*) é o conjunto de ferramentas numéricas e computacionais utilizadas para resolver, visualizar e interpretar a solução das equações de balanço de momento, massa e energia. Tal ferramenta utiliza técnicas numéricas avançadas para solucionar problemas complexos da engenharia e da física, já que esse tipo de simulação computacional é capaz de prever fenômenos físicos e físico-químicos que ocorrem em um dado escoamento. Hoje em dia, essa ferramenta vem sendo cada vez mais utilizada em aplicações industriais como, por exemplo no refino.

O processo de craqueamento consiste na quebra de moléculas pesadas presentes no gasóleo e resíduos, por ação de um catalisador, esse processo se divide, basicamente, em três seções: o reator, onde ocorrem as reações de craqueamento; até três estágios de ciclones, que fazem retornar ao leito o catalisador arrastado pela corrente craqueada; o regenerador, onde o catalisador é regenerado; e o retificador (*stripper*).

O craqueamento catalítico é um dos processos mais importantes da área de refino no mundo, por isso, o interesse de entender a fluidodinâmica que envolve esse processo, principalmente no *riser* (reator), onde ocorrem 90% das reações. Nesse reator tubular, o gasóleo, na fase líquida, pré-misturado com vapor d'água, é alimentado na parte inferior do mesmo com temperatura a cerca de 300°C. Posteriormente, ele é misturado a uma carga de catalisador sólido a 700°C, proveniente do regenerador, vaporizando o gasóleo instantaneamente, e iniciando, assim, a reação de craqueamento. É interessante salientar que essa zona de entrada tem como característica ser a região de maiores gradientes de concentração, temperatura e energia cinética turbulenta. Assim, o escoamento no interior do *riser* é de extrema complexidade, já que envolve uma série de fenômenos físicos e químicos (fluidodinâmica, transferência de calor, transferência de massa e reações químicas). Apesar da existência de várias abordagens para se tentar representar esses fenômenos, ainda hoje não se sabe explicar todos os fenômenos que ocorrem no interior do reator.

## 2. REVISÃO DA LITERATURA

O riser possui duas entradas e uma saída. Na entrada inferior, a carga composta por vapor d'água e gotículas de gásóleo entra no reator. Na entrada lateral, o catalisador é introduzido no reator, com temperatura elevada. Na saída superior, os gases craqueados deixam o reator. O conhecimento do escoamento na região de contato entre catalisador e gásóleo é fundamental para o entendimento dos fenômenos que ocorrem no riser. Por exemplo, variáveis de processo, como perda de carga, são afetadas dependendo da forma como esse contato é realizado. Além disso, é nessa região onde observamos maiores gradientes de pressão, temperatura e concentração, já que as cargas têm temperaturas diferentes (Rosa e Mori, 2002). Ao longo do riser as partículas quentes (em torno de 700°K) transferem energia para as outras duas fases, até que as gotículas são evaporadas, enquanto que, concomitantemente, a reação de craqueamento se inicia. A partir de experimentos, hoje, se sabe que as partículas se concentram predominantemente na parede e tendem a descer por ela, afetando a conversão, que é função da concentração de catalisador (Jaci e Mori, 2005).

A fluidodinâmica do riser vem sendo desenvolvida por diversos autores, como Gidaspow (1994). Atualmente, problemas multifásicos são baseados em dois tipos básicos de abordagens: a Euleriana e a Lagrangeana. A modelagem Lagrangeana trata cada partícula individualmente, resolvendo a equação de Newton para cada unidade, podendo considerar o choque entre as mesmas, colocando o peso da perda de energia cinética das partículas por choque em um coeficiente de restituição ( $e$ ). Ademais, essa abordagem contabiliza muito bem o efeito da fase fluida sobre fase particulada, mas, essa modelagem não é recomendada para problemas onde a quantidade de partículas é grande (ANSYS, 2007). Na abordagem Euleriana, correntemente empregada para suspensões com altas concentrações de partículas, resolve-se um conjunto de equações de conservação para cada uma das fases. A principal dificuldade associada a esta abordagem está em identificar as propriedades reológicas (viscosidade) da fase sólida. Para superar essa dificuldade, foi desenvolvido o modelo de teoria cinética granular.

A teoria cinética granular tem forte analogia com a teoria cinética dos gases e a partir dela podemos calcular propriedades inerentes a fluidos como viscosidade, pressão (semelhante a uma equação de estado) e temperatura granular (Gidaspow, 1994), a partir de equações que são funções da flutuação da velocidade e da fração volumétrica do leito. Com este tipo de modelagem, é possível identificar o escoamento core-annular, que aumenta a ineficiência do contato gás-sólido (Huili e Gidaspow, 2003), sendo assim uma forma promissora de modelagem para fase particulada.

## 3. MODELAGEM

Neste trabalho, foram realizadas simulações numéricas do escoamento bifásico (catalisador e gásóleo) através de um riser utilizando a abordagem euleriana, uma vez que, segundo a literatura, com esta abordagem é possível representar-se bem resultados experimentais (Rosa e Mori, 2002). Para a fase, particulada foi escolhido o modelo de teoria cinética granular, a fim de determinar as propriedades reológicas, e, para a viscosidade turbulenta, empregou-se um modelo a zero equação. Para a fase gasosa (gásóleo) foi utilizado o modelo de turbulência k- $\epsilon$ . Por simplicidade, considerou-se o escoamento como sendo isotérmico para ambas as fases. As equações abaixo representam a modelagem matemática utilizada neste trabalho. A modelagem proposta é semelhante à discutida por Jaci e Mori (2005), adicionando-se um modelo para a viscosidade do sólido.

### 3.1. Equações Governantes

#### 3.1.1. Equação da Continuidade

$$\frac{\partial(r_{\alpha}\rho_{\alpha})}{\partial t} + \nabla \cdot (r_{\alpha}\rho_{\alpha}U_{\alpha}) = 0 \quad (1)$$

$$\sum_{\beta=1}^{N_p} r_{\beta} = 1 \quad (2)$$

Onde  $r_{\alpha}$ ,  $\rho_{\alpha}$  e  $U_{\alpha}$  são a fração volumétrica, densidade e velocidade, respectivamente,  $\alpha$  e  $\beta$  representam cada fase, em particular, e  $N_p$  é o número total de fases.

#### 3.1.2. Equação de conservação do momento

**Fase fluida:**

$$\frac{\partial(r_{\alpha}\rho_{\alpha}U_{\alpha})}{\partial t} + \nabla \cdot (r_{\alpha}(\rho_{\alpha}U_{\alpha} \otimes U_{\alpha})) = -r_{\alpha}\nabla p_{\alpha} + \nabla \cdot (r_{\alpha}\mu_{\alpha}(\nabla U_{\alpha} + \nabla U_{\alpha}^T)) + M_{\alpha} \quad (3)$$

Onde  $p_{\alpha}$  é a pressão de uma das fases e  $M_{\alpha}$  representa a transferência de momento entre as fases.

**Fase particulada** – inclui os efeitos de colisão entre as partículas na equação de conservação de momento, a partir do tensor tensão  $\tau_{sij}$  para as partículas (a obtenção dos parâmetros para esse tensor serão descritos a seguir).

$$\tau_{sij} = -p_s \delta_{ij} + \mu_s \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) + \zeta_s \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (4)$$

**Transferência de momento** (modelo para o coeficiente de arraste).

Para estimar o coeficiente de arraste utilizamos a correlação proposta por Wen e Yu (1996).

$$C_d = r_\beta^{-1.65} \cdot \max \left( \frac{24}{Re'} (1 + 0.15 Re'^{0.687}), 0.44 \right) \quad (5)$$

$$Re' = r_\beta \cdot Re \quad (6)$$

Onde  $C_d$  é o coeficiente de arraste,  $Re$  é o número de Reynolds (Equação 7) e  $d_p$  é o diâmetro da partícula.

$$Re = \frac{|U_a - U_s| \rho_a r_\alpha d_p}{\mu_a} \quad (7)$$

### 3.1.3. Modelo de Turbulência.

Para o problema foi utilizado o modelo de duas equações k-ε para obter a viscosidade turbulenta da fase fluida. Esse modelo associa a viscosidade turbulenta  $\mu_t$  com a energia cinética turbulenta  $k$  e sua dissipação  $\varepsilon$  via a seguinte relação:

$$\mu_t = \frac{C_\mu \rho_g k^2}{\varepsilon} \quad (8)$$

Para determinar  $k$  e  $\varepsilon$  são acrescentadas duas equações diferenciais de transporte para a energia cinética turbulenta e a para a sua dissipação.

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U k) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \varepsilon \quad (9)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U \varepsilon) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon) \quad (10)$$

Onde  $C_{\varepsilon 1}$ ,  $C_{\varepsilon 2}$ ,  $\sigma_k$ ,  $\sigma_\varepsilon$  são constantes e  $P_k$  representa a produção de turbulência.

### 3.1.4. Modelo da Teoria Cinética Granular

Este modelo é utilizado para determinar os parâmetros do tensor  $\tau_{sij}$ .

- **Temperatura granular ( $\theta_s$ )** é calculada a partir de um modelo a zero equação.

- **Pressão do sólido ( $p_s$ )**

$$p_s = r_s \rho_s \theta (1 + 2(1 + e) g_0 r_s) \quad (11)$$

$$g_0 = 0.6 \left( 1 - \left( \frac{r_s}{r_{ms}} \right)^{1/3} \right)^{-1} \quad (12)$$

Onde  $g_0$  é a função de distribuição radial (computa a probabilidade de colisão entre partículas) e  $e$  é o coeficiente de restituição.

- **Viscosidades do sólido.**

$$\zeta_s = \frac{4}{3} r_s^2 \rho_s d_p g_0 (1 + e) \sqrt{\frac{\theta_s}{\pi}} \quad (13)$$

$$\mu_s = \mu_{s,col} + \mu_{s,kin} \quad (14)$$

$$\mu_{s,col} = \frac{4}{5} r_s^2 \rho_s d_p g_0 (1 + e) \sqrt{\frac{\theta_s}{\pi}} \quad (15)$$

$$\mu_{s,kin} = \frac{5\sqrt{\pi}}{48} \frac{\rho_s d_p}{g_0 (1+e)} \left(1 + \frac{4}{5} r_s g_0 (1 + e)\right)^2 \sqrt{\theta_s} \quad (16)$$

Onde  $\zeta_s$  é a viscosidade *bulk* (Lun *et al.*, 1984) e  $\mu_s$  é a viscosidade de cisalhamento (Gidaspow, 1994).

#### 4. METODOLOGIA

A Tabela 1 apresenta as propriedades físicas das fases empregadas.

Tabela 1. Propriedades físicas do sólido e do fluido.

|                                  |                           |
|----------------------------------|---------------------------|
| Densidade das partículas         | 1500 kg m <sup>-3</sup>   |
| Diâmetro da partícula            | 60 µm                     |
| Viscosidade cinemática do sólido | 10 <sup>-8</sup> Pa s     |
| Viscosidade cinemática do fluido | 1,4x10 <sup>-5</sup> Pa s |
| Densidade do fluido              | 5 kg m <sup>-3</sup>      |

A fim de simplificar o problema, simulou-se apenas a região imediatamente após a entrada de catalisador e imediatamente antes da saída lateral do reator. O reator tem as seguintes dimensões: 0,1 m de maior raio, 0,8 m de menor raio e 12 metros de altura. A Figura 1 mostra a malha hexaédrica empregada.

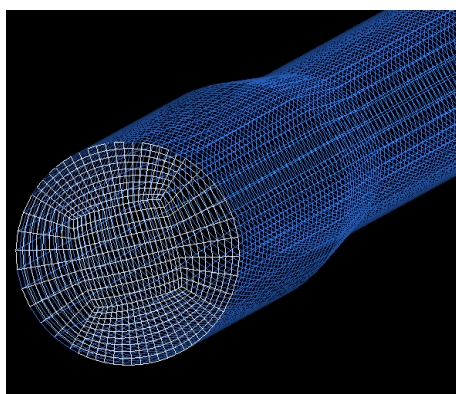


Figura 1. Detalhe da região inferior da malha hexaédrica (282 mil nós) empregada.

As condições de contorno na entrada foram fluxo de massa do catalisador de 127 kg m<sup>-2</sup> s<sup>-1</sup> e velocidade do gásóleo igual a 6 m s<sup>-1</sup>. O critério de convergência utilizado foi resíduo máximo de 10<sup>-4</sup>.

#### 5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os resultados de fração volumétrica foram avaliados em várias regiões: região densa (primeiros metros), região desenvolvida e região diluída (Figuras 2 a 8). Foi observado que na região densa as partículas se encontram concentradas significativamente na parede, o que está de acordo com a literatura (Jaci e Mori, 2005). Nesses primeiros metros, ocorrem grandes gradientes axiais de concentração, enquanto que, na região desenvolvida, a concentração praticamente não varia no sentido axial (Figura 12). Apesar disso, nesta região, a fração volumétrica de particulados ainda se mantém maior próximo às paredes. Esse fato pode ser explicado pelas menores velocidades do gás naquelas regiões.

Como se pode observar nas Figuras 7, 9 e 12, na região desenvolvida, a concentração de catalisador se torna praticamente constante com a altura. Logo, pode-se concluir que a velocidade de arraste é o parâmetro que determina como as partículas serão distribuídas ao longo do *riser*. Essa distribuição afetará indiretamente a conversão do gásóleo em produtos, pois a equação da taxa é função da concentração de catalisador (Rosa e Mori, 2002).

Os resultados de queda de pressão também estão coerentes com o esperado (Rosa e Mori, 2002). A pressão varia quase que linearmente ao longo do *riser* (Figura 10).

O perfil de velocidades da fase sólida se mostra coerente, exceto pelo fato de não ter sido observado recirculação de partículas na parede.

As Figuras 10 e 11 comprovam que na região desenvolvida a fração volumétrica praticamente não varia onde a velocidade se mantém constante.

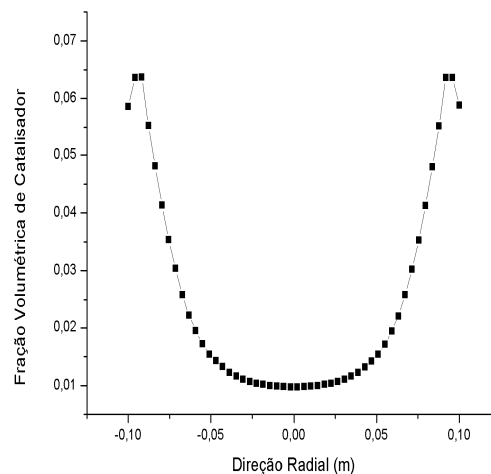
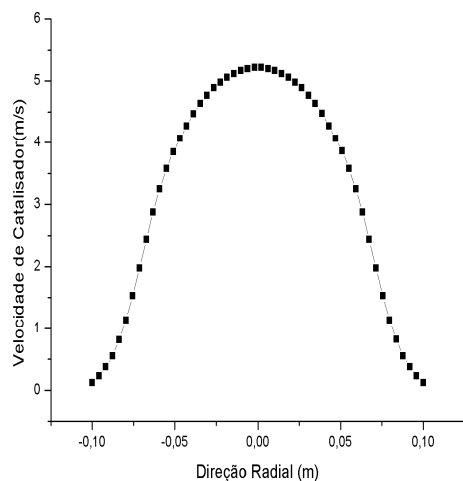


Figura 2. Perfil de velocidades a uma altura de 0,25 m.

Figura 3. Fração volumétrica de sólidos a uma altura de 0,25 m

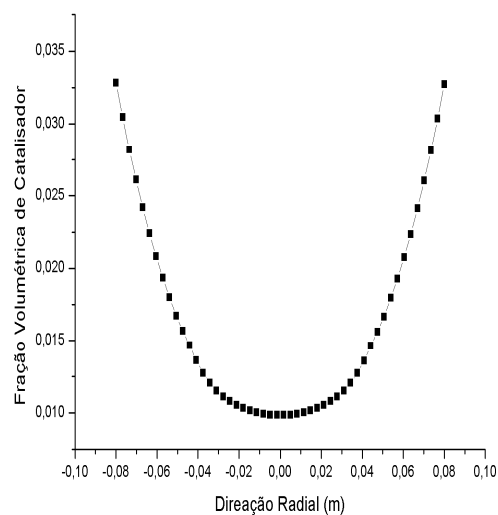
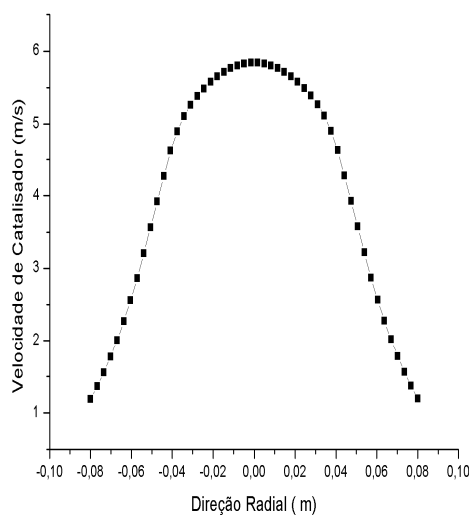


Figura 4. Perfil de velocidades a uma altura de 0,5 m.

Figura 5. Fração volumétrica de sólidos a uma altura de 0,5 m.

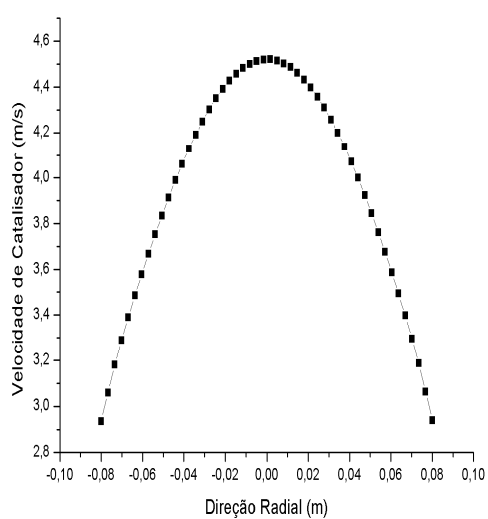


Figura 6. Perfil de velocidades a uma altura de 5 m.

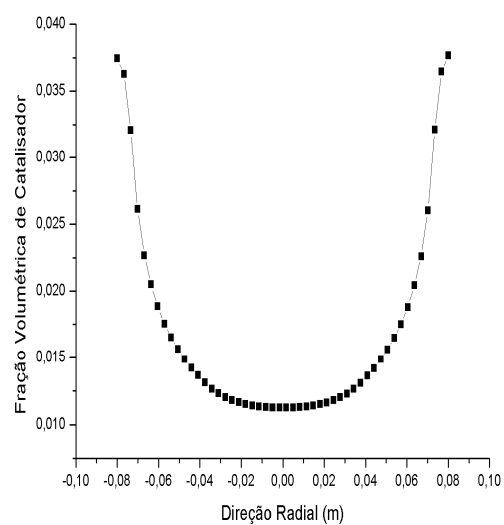


Figura 7. Fração volumétrica de sólidos a uma altura de 5 m.

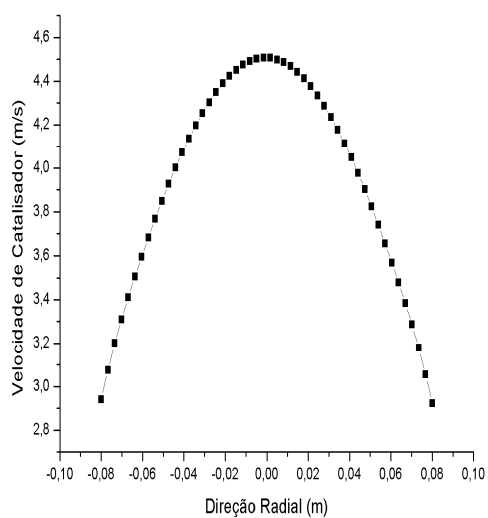


Figura 8. Perfil de velocidades a uma altura de 10 m

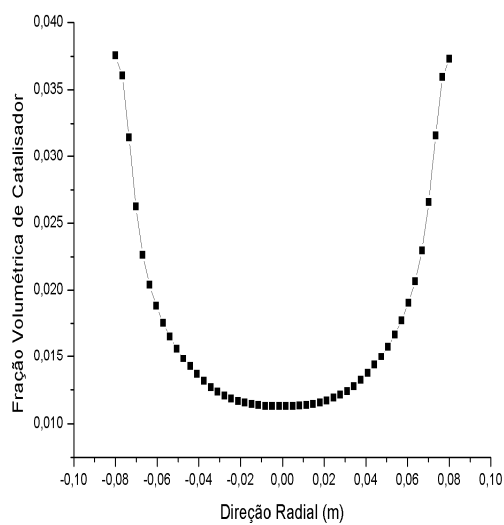


Figura 9. Fração volumétrica de sólidos a uma altura de 10 m.

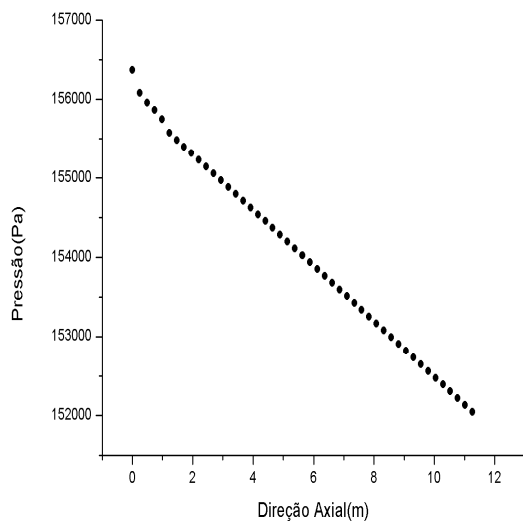


Figura 10 . Queda de pressão ao longo do *riser*.

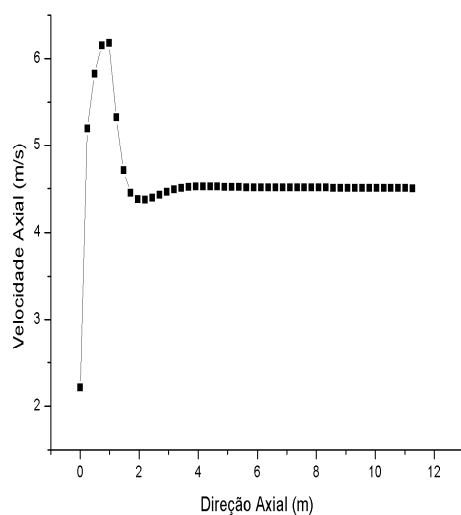


Figura 11. Perfil de velocidades ao longo do *riser*.

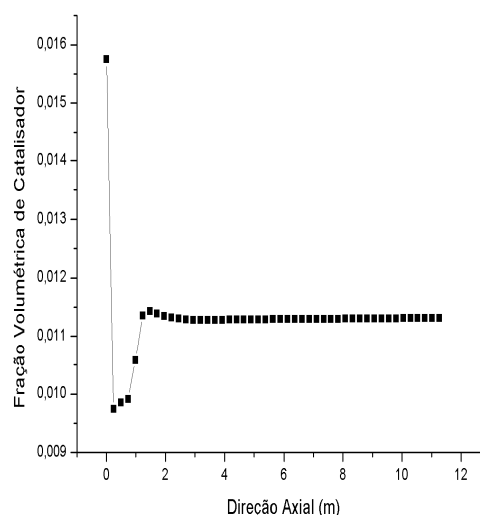


Figura 12. Fração volumétrica ao longo do *riser*.

## 6. CONCLUSÕES

Os resultados obtidos na simulação foram compatíveis com o esperado para a fração volumétrica de sólidos, a queda de pressão e o perfil de velocidades. Entretanto, algumas informações são perdidas com o tipo de abordagem utilizada como, por exemplo, a distribuição de partículas, já que a conversão é função do tamanho e da concentração de catalisador ao longo do reator. Interessante salientar, que a utilização de um modelo de teoria cinética granular para fase particulada mostrou-se promissora, apesar de dificultar bastante a convergência.

Como trabalho futuro, pretende-se incluir efeitos de entrada e aplicar novas técnicas para modelar os fenômenos turbulentos, já que a transferência de turbulência entre as fases não foi computada. É interessante utilizar a abordagem SAS (Ansys, 2007) para fase gasosa, a fim de se verificar até que ponto esse tipo de abordagem pode melhorar os resultados.

## 7. REFERÊNCIAS.

- HUILIN, L., GIDASPOW, D., Hydrodynamics of binary fluidization in a riser: CFD simulation using two granular temperatures, *Chemical Engineering Science*, n.58, p.3777-3792, agosto 2003.
- NERI, A., GIDASPOW, D., Riser Hydrodynamics: Simulation using Kinetics Theory. *AIChE Journal*, v.46, n.1, 2000.
- ROSA, L.M Simulação de Reações e Consumo de Calor em Reatores Riser. Dissertação de Mestrado, UNICAMP, Campinas-SP, 2002.
- C.K.K. LUN, S.B. SAVAGE D.J. JEFFERY, and N. CHEPUMY, Kinetic Theories for Granular Flow : Inelastic Particles in Couette Flow and Slightly Inelastic Particles in a General Flow Field, *Journal Fluid Mechanics*., 140, pp. 223-256, 1984.
- GIDASPOW, D., Multiphase Flow and Fluidization, *Academic Press*, 1994.
- SAMUELSBERG, A., HJERTAGER, B. H., Computational Modeling of Gas/Particle Flow in a Riser. *AIChE Journal*, v. 42, n. 6, p. 1536-1546, 1996.
- JACI, C.S.C.B, Simulação do Escoamento Gás-Sólido em um Duto Cilíndrico Vertical em Leito Fluidizado Rápido Aplicando a Técnica CFD. Dissertação de Mestrado, UNICAMP, Campinas-SP, 2005.
- ANSYS, CFX-11 Manual, Ansys Inc., Berkeley, 2007.

## NUMERICAL SIMULATION OF THE FLUID DYNAMICS OF A CATALYTIC CRACKING RISER

The Fluid Catalytic Cracking (FCC) process has great importance in oil refining, especially in countries, like Brazil, that needs to crack heavy oils with large chains. There are some basic equipment that make part of this process: the reactor (riser), the cyclones and the regenerator; however, it is in the riser that occurs the largest part of the reactions of catalytic cracking. That is the reason why there is a great interest to understand the behavior of the flow in that region. The computational fluid dynamics is a powerful tool with application in practically all fields of chemical engineering. This tool is being used in fluid flow, because it allows investigating the fluid flow behavior inside apparatuses, without the need of spending time to carry out experiments. In this work, numerical simulations of the two-phase flow (catalyst and gasoil) through the riser had been carried out, using a commercial package of computational fluid dynamics (CFX 11.0). The turbulence models were k-ε for fluid phase and a zero equation for solid dispersed phase. A granular kinetic theory was used to determinate the viscosity of the solid dispersed phase, since a eulerian approach was used. Real flow conditions of a FCC unit were used. Based in the simulation results, it was possible to find velocity, concentration and pressure profiles in the riser with good agreement with the ones reported in the literature. This shows that granular kinetic theory used is a reasonable model to evaluate the physics of the two-phase problem in FCC risers.

*Computational Fluid-dynamics, Numerical simulation, CFD, riser, FCC, fluidized bed, catalyst*