



CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DO PARANÁ

UNIDADE DE CURITIBA

DEPARTAMENTO DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

E DE MATERIAIS - PPGEM

RAUL HENRIQUE ERTHAL

MODELAGEM E SIMULAÇÃO DINÂMICA DE UM CONVERSOR DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO

CURITIBA

SETEMBRO - 2003

RAUL HENRIQUE ERTHAL

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

MODELAGEM E SIMULAÇÃO DINÂMICA DE UM CONVERSOR DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO

Dissertação apresentada como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica, do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais, Área de Concentração: Engenharia Térmica, do Departamento de Pesquisa e Pós-Graduação, da Unidade de Curitiba, do CEFET-PR.

Orientador: Prof. César O. R. Negrão, PhD

Co-orientador: Prof. Luciano Fernando dos Santos Rossi

CURITIBA

SETEMBRO - 2003

TERMO DE APROVAÇÃO

RAUL HENRIQUE ERTHAL

MODELAGEM E SIMULAÇÃO DINÂMICA DE UM CONVERSOR DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO

Dissertação de Mestrado aprovada como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica, do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais, do Departamento de Pesquisa e Pós-Graduação, da Unidade de Curitiba, do CEFET-PR, pela seguinte banca examinadora:

Orientador: Prof. Cezar Otaviano Ribeiro Negrão, PhD.

Departamento Acadêmico de Mecânica, CEFET-PR.

Prof. Waldir Pedro Martignoni, PhD.

PETROBRAS S/A

Prof. Lúcia Valéria Ramos de Arruda, Dr.

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica e Informática Industrial, CEFET-PR

Prof. Admilson Teixeira Franco, Dr.

Departamento Acadêmico de Mecânica, CEFET-PR.

Curitiba, 30 de Setembro de 2003.

Dedico este trabalho aos meus pais e irmãos, à minha família e aos integrantes do Laboratório de Ciências Térmicas.

AGRADECIMENTOS

Aos meus companheiros de equipe no projeto OCUCC (Otimização e Controle de Unidades de Craqueamento Catalítico), Jobber Chaves Penteado e Rosilaine Furtado de Melo, cujas participações foram imprescindíveis para a realização deste trabalho.

Aos alunos do CPGEI (Curso de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica e Informática Industrial) Charles Gentilim, Antonio Eduardo M. Ramos e Henrique Westphal, pelo apoio prestado na implementação do algoritmo.

Ao meu orientador Prof. Cezar Otaviano Ribeiro Negrão, por ter confiado a mim este trabalho. Sua presença foi extremamente importante, demonstrando sempre grande profissionalismo, apoiando, discutindo os melhores caminhos, alertando e sempre transmitindo muita segurança.

Ao Prof. Luciano Fernando dos Santos Rossi, meu co-orientador, pelo importante papel representado, dando o suporte necessário e se prontificando de imediato quando procurado.

Ao CEFET, e mais especificamente aos professores do PPGEM, pela oportunidade de cursar este programa, que certamente possibilitou meu engrandecimento profissional, abrindo as portas para novos conhecimentos e desafios.

À PETROBRAS que, junto com a FINEP, financiou o projeto OCUCC (Otimização e Controle de Unidades de Craqueamento Catalítico).

À Agência Nacional do Petróleo – ANP – e a Financiadora de Estudos e Projetos – FINEP – através do Programa de Recursos Humanos da ANP para o Setor de Petróleo e Gás – PRH/MCT.

RESUMO

O presente trabalho tem por objetivo apresentar um modelo dinâmico de um conversor de craqueamento catalítico fluidizado (FCC). Os três principais componentes do FCC são incluídos na modelagem: *riser*, o conjunto vaso separador/*stripper* e o regenerador. O trabalho está voltado para o estudo do escoamento gás-sólido, unidimensional e quase-estático do *riser*. Para representar a cinética das reações no *riser*, é empregado um modelo de 4-*lumps*. Tanto o conjunto vaso separador/*stripper* quanto o regenerador são modelados como CSTR (*Continuous Stirred Tank Reactor*), onde as propriedades físico-químicas são consideradas uniformes ao longo do volume. O regenerador é composto de uma região densa que compreende duas fases. São utilizados os princípios de conservação da quantidade de movimento, da energia e da massa, dando origem a um conjunto de equações diferenciais ordinárias. As equações do *riser* são resolvidas pelo método das diferenças finitas e um procedimento de correção da pressão, utilizando a conservação da massa, é empregado no acoplamento das equações. As equações para o reator e regenerador são resolvidas pelo método de Runge-Kutta de quarta ordem.

Faz-se uma verificação do modelo que compreende: i) uma análise de sensibilidade da malha espacial no *riser* e temporal nos demais componentes; ii) uma avaliação do critério de convergência nos resultados; iii) uma comparação com dados experimentais de uma planta piloto de FCC em regime estacionário; e iv) uma avaliação do efeito das condições iniciais nos resultados em regime estacionário.

Resultados do modelo do *riser* e do FCC como um todo mostram o comportamento de uma série de variáveis importantes para a compreensão física do fenômeno. Verifica-se a sensibilidade da razão catalisador/gasóleo e da temperatura do catalisador na entrada do *riser* em relação à temperatura do catalisador, o teor de coque e a taxa de conversão de produtos na saída do *riser*. É feita uma avaliação do modelo quando submetido a ações de controle tipo Proporcional-Integral nas válvulas TCV, LCV e de gases. As respostas dinâmicas do modelo do conversor são analisadas através da aplicação de distúrbios em variáveis operacionais.

Palavras-chave: FCC, *riser*, modelagem dinâmica.

ABSTRACT

The current work presents a dynamic model of a Fluid Catalytic Cracking (FCC) unit. The three main components of FCC are included in the mathematical modeling: the *riser*, the separator vessel/*stripper* compound and the regenerator. The emphasis of the work relies on the quasi-steady, one-dimensional gas-solid flow of the *riser*. Four lumps are employed for the kinetic reactions of the *riser*. Both the reactor and the regenerator are modeled as CSTRs (Continuous Stirred Tank Reactors) and the physical-chemicals properties are considered uniform throughout the volume. The regenerator is composed of a dense region which consists of two phases. The conservation principles of momentum, energy and mass are employed and as a result of this a set of ordinary differential equations are obtained. The equations of the *riser* are solved by the finite difference method and a pressure correction procedure, which employs the mass conservation, is used to couple the equations. The equations for the reactor and regenerator are solved by the 4th order Runge-Kutta's method.

A model verification was conducted considering: i) sensitivity analysis of the spacial grid for the *riser* equations and a temporal grid for the other components; ii) evaluation of the convergence criteria in the results; iii) comparison with steady-state experimental results of a steady-state FCC pilot plant; and iv) evaluation of the effect of the initial conditions in the steady-state results.

Results of the *riser* and the whole FCC show the behavior of a number of important variables for the understanding of the physical aspects of the phenomenon. A sensitivity analysis of the catalyst/gasoil ratio and inlet catalyst temperature in the *riser* outlet temperature, coke fraction and conversion ratio of the products was also carried out. Finally, the effect of the Proportional-Integral controller on the TCV, LCV and gas valves was verified. The dynamic output of the model for the converter was analyzed by the application of excitation on the operational variables.

Key-words: FCC, *riser*, dynamic model.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Ilustração simplificada do processo de craqueamento.	16
Figura 2 – Ilustração de uma planta de craqueamento catalítico.	16
Figura 3 - Esquema simplificado de conversor FCC.	18
Figura 4 – Desenho esquemático do modelo do <i>riser</i>	34
Figura 5 - Desenho esquemático da seção de vaporização.	34
Figura 6 - Esquema das interações de massa, energia e quantidade de movimento entre as fases sólida e gasosa em um volume de controle infinitesimal.	38
Figura 7 - Esquema das interações de quantidade de movimento entre as fases sólida e gasosa em um volume de controle infinitesimal.	39
Figura 8 - Esquema das interações de energia entre as fases sólida e gasosa em um volume de controle infinitesimal.	42
Figura 9 - Desenho esquemático representativo da cinética das reações da fase gasosa.	44
Figura 10 - Volume de controle infinitesimal representativo da conservação das espécies químicas.	45
Figura 11 - Desenho esquemático do modelo do reator.	49
Figura 12 - Esquema do modelo de Leito Borbulhante	54
Figura 13 - Sistema de controle de temperatura de catalisador na saída do <i>riser</i> .	64
Figura 14 – Desenho esquemático de um elemento nodal.	67
Figura 15 – Algoritmo de solução das equações do <i>riser</i> .	77
Figura 16 - Algoritmo de solução do reator segundo Melo (2003).	79
Figura 17 - Algoritmo de solução das equações do regenerador segundo Penteado (2003).	80
Figura 18 - Algoritmo de solução integrada.	82
Figura 19 - Diferentes malhas para o <i>riser</i> .	86

Figura 20 - Variação da pressão ao longo do <i>riser</i> para diferentes critérios de convergência e 72 elementos nodais.	87
Figura 21 – Variação da temperatura ao longo do <i>riser</i> para diferentes critérios de convergência e 72 elementos nodais.	87
Figura 22 – Variação das velocidades de gás e de sólido ao longo do <i>riser</i> para diferentes critérios de convergência e 72 elementos nodais.	88
Figura 23 - Variação de pressão ao longo do <i>riser</i> em função do número de pontos e critério de convergência de 0,1%.	88
Figura 24 –Variação das temperaturas ao longo do <i>riser</i> em função do número de pontos e critério de convergência de 0,1 %.	89
Figura 25 - Variação das velocidades das fases para diferentes malhas e critério de convergência de 0,1 %.	89
Figura 26 – Variação da pressão ao longo do <i>riser</i> em função do número de pontos e critério de convergência de 0,01%	90
Figura 27 – Variação das temperaturas das fases ao longo do <i>riser</i> em função do número de pontos e critério de convergência de 0,01 %.	90
Figura 28 – Variação das velocidades das fases para diferentes malhas e critério de convergência de 0,01 %.	91
Figura 29 - Vazões de catalisador gasto e regenerado.	94
Figura 30 - Resposta dinâmica da temperatura do regenerador para duas condições iniciais.	95
Figura 31 - Resposta dinâmica da temperatura no reator para diferentes condições iniciais da temperatura do regenerador.	95
Figura 32 - Resposta dinâmica da pressão para duas temperaturas iniciais do regenerador.	96
Figura 33 - Temperaturas das fases sólida e gasosa ao longo do <i>riser</i> .	101
Figura 34 - Frações de <i>lumps</i> ao longo do <i>riser</i> .	102
Figura 35 - Massa molecular da fase gasosa ao longo do <i>riser</i> .	103

Figura 36 - Velocidades das fases ao longo do <i>riser</i>	103
Figura 37 - Fração de vazios ao longo do <i>riser</i>	104
Figura 38 - Pressão ao longo do <i>riser</i> .	104
Figura 39 - Taxa de conversão em função da razão catalisador/gasóleo para duas temperaturas de entrada de catalisador.	107
Figura 40 - Vazões de catalisador gasto e regenerado.	109
Figura 41 – Pressões no conversor.	110
Figura 42 – Temperaturas no conversor.	110
Figura 43 – Frações de gases no regenerador.	111
Figura 44 – Frações de coque nos catalisadores gasto e regenerado.	112
Figura 45 – Relação coque/ar na entrada do regenerador.	113
Figura 46 - Comportamento da abertura da válvula FV para o caso 1.	115
Figura 47 - Comportamento das pressões para o caso 1.	115
Figura 48 - Vazões de catalisador pelas válvulas TCV e LCV para o caso 2.	116
Figura 49 – Comportamento do nível do reator para o caso 2.	117
Figura 50 - Temperatura no topo do <i>riser</i> para o caso 2.	117
Figura 51 - Vazões de gás pelas válvulas FV e GV para o caso 3.	118
Figura 52 - Diferencial de pressão entre o regenerador e o reator.	119
Figura 53 - Esquema do conversor Houdry (Abadie, 1997).	127
Figura 54 - Esquema do conversor Esso, Modelo IV (Abadie, 1997).	129
Figura 55 - Esquema da evolução do conversor Esso, Modelo IV (Abadie, 1997).	130
Figura 56 - Esquema do conversor flexcracking transfer line (Abadie, 1997).	130
Figura 57 - Esquema do conversor UOP STACKED Ultra-Ortoflow (Abadie, 1997).	132

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Algoritmo de solução das equações do modelo do conversor com as respectivas equações.	83
Tabela 2 – Valores de algumas variáveis na saída do <i>riser</i> em função da malha e dos critérios de convergência escolhidos.	92
Tabela 3 - Malhas e critérios de convergência para os modelos do <i>riser</i> e do conversor.	93
Tabela 4 - Principais parâmetros geométricos e operacionais da planta.	96
Tabela 5 - Condições de contorno da planta.	97
Tabela 6 - Resultados da comparação dos resultados da planta e do modelo em regime estacionário.	98
Tabela 7 - Efeito da razão catalisador/óleo e temperatura de entrada de catalisador nos parâmetros do <i>riser</i> .	106
Tabela 8 - Efeito da razão catalisador/gasóleo e do coque na carga de alimentação nos parâmetros do <i>riser</i> .	108
Tabela 9 - Dados cinéticos do modelo do <i>riser</i> (Han e Chung (2000)).	133
Tabela 10 - Dados cinéticos da desativação do catalisador (Han e Chung (2000)).	133

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CSTR	- <i>Continue Stirred Tank Reaction</i> (Reator Tanque de Mistura Contínua)
EDO	- Equação Diferencial Ordinária
FCC	- <i>Fluid Catalytic Cracking</i>
FV	- <i>Fractionator Valve</i> (Válvula da Fracionadora)
GV	- <i>Gas Valve</i> (Válvula de Gás)
LCV	- <i>Level Control Valve</i> (Válvula de Controle de Nível)
PETROBRAS	- Petróleo Brasileiro S.A.
TCV	- <i>Temperature Control Valve</i> (Válvula de Controle de Temperatura)

LISTA DE SÍMBOLOS

Nome	Descrição	Unidade
a	abertura de válvula	%
A	área transversal	m^2
A_e	área efetiva de transferência de calor	m^2/m^3
A_p	área superficial do catalisador	m^2
C	concentração molar; constante	k_{mol}/m^3
C_D	coeficiente de arraste	-
c_p	calor específico	kJ/kgK
D	coeficiente de difusão de massa	$1/s$
d	diâmetro	m
E	energia de ativação	kJ/kg
e	erro	
F	força	N
F_D	força de arraste	N/m^3
f	fator de atrito	-
g	aceleração da gravidade	m/s^2
H	entalpia	kJ/kg
H_r	entalpia de reação	kJ/m^3
h	altura	m
K_j	constante da válvula j	-
K_p	ganho proporcional	-
K_I	ganho integral	-
k	coeficiente de condutividade térmica	kJ/kgK
k_j	constante de reação do <i>lump</i> i	$1/s$
k_{j0}	constante pré-exponencial do <i>lump</i> i	$1/s$
L	nível	m
M_w	massa molecular	kg/k_{mol}
m	massa	kg
$\dot{m}$	vazão mássica	kg/s
P	pressão	Pa

Q	calor	kJ
q_R	calor de reação	kJ/kg
$\bar{R}$	constante universal dos gases perfeitos	kJ/k _{mol} K
R_{AN}	relação entre aromáticos e naftênicos da carga de gasóleo	-
Re	número de Reynolds	-
r^m	taxa de reação	k _{mol} /m ³ s
T	temperatura	K
T_{ref}	temperatura de referência	K
T_I	tempo integral	
t	tempo	s
u	ação de controle	
V	volume	m ³
v	velocidade	m/s
v_0	velocidade superficial	m/s
Y_{CC}	carbono Conradson	kg _{coque} / kg _{gol}
y	fração de componente de fase gasosa	-

Subscritos

AR	ar de alimentação
B	bolha
b	base
c	catalisador
cq	coque
D	densa
E	emulsão
FV	Válvula da fracionadora
GV	Válvula de gás
g	gás
gol	gasóleo líquido
go	gasóleo vaporizado
gc	gás combustível

<i>gl</i>	gasolina
<i>i</i>	Componente de fase gasosa
<i>j</i>	componente das fases do escoamento no <i>riser</i> ; jusante
<i>m</i>	montante
<i>mf</i>	mínima fluidização
<i>n</i>	norte
<i>p</i>	parede
<i>qm</i>	quantidade de movimento
<i>RA</i>	reator
<i>RG</i>	regenerador
<i>RS</i>	<i>riser</i>
<i>ST</i>	<i>stripper</i>
<i>SV</i>	seção de vaporização
<i>s</i>	sul
<i>VS</i>	vaso separador
<i>v</i>	vapor
<i>vl</i>	vapor de <i>lift</i>
<i>vd</i>	vapor de dispersão
<i>z</i>	coordenada de posição axial no <i>riser</i>

LETRAS GREGAS

Nome	Descrição	Unidade
α	coeficiente de transferência de calor	kW/m ² K
α_c	coeficiente de desativação do catalisador	-
α_{c0}	coeficiente pré-exponencial de α	-
α_{c0}^*	expoente para representação de α_c	-
χ	variável genérica	-
δ	fração de bolhas	-
ε	fração de volume	-
φ	esfericidade	-
ϕ_c	coeficiente de desativação do catalisador	-
γ	peso específico	N/m ³
μ	viscosidade dinâmica	Pa.s
π	pi	-
ρ	massa específica	kg/m ³
τ	tensão de cisalhamento	N/m ²
ν	teor de coque remanescente no <i>stripper</i>	-
ω	teor	-
ζ_{set}	valor ajustado para a variável a ser controlada	[]
ζ	valor da variável controlada	[]

SUMÁRIO

AGRADECIMENTOS

RESUMO

ABSTRACT

LISTA DE FIGURAS

LISTA DE TABELAS

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

LISTA DE SÍMBOLOS

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	15
1.1	CRAQUEAMENTO CATALÍTICO	15
1.2	DESCRIÇÃO DO PROCESSO DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO	17
1.3	MODELAGEM MATEMÁTICA	20
1.4	MODELAGEM DE FCC	21
1.5	OBJETIVOS.	22
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	25
2.1	HISTÓRICO DA MODELAGEM DE FCC	25
2.2	PRESENTE TRABALHO	30
3	MODELAGEM	33
3.1	INTRODUÇÃO	33
3.2	MODELO DO <i>RISER</i>	33
3.2.1	CONSERVAÇÃO DA QUANTIDADE DE MOVIMENTO	38
3.2.2	EQUAÇÃO DA CONSERVAÇÃO DA ENERGIA	41
3.2.3	EQUAÇÃO DA CONSERVAÇÃO DAS ESPÉCIES QUÍMICAS	45
3.2.4	EQUAÇÃO DA CONSERVAÇÃO DA MASSA	48
3.2.5	EQUAÇÃO DE ESTADO	48
3.3	REATOR	49
3.3.1	EQUAÇÃO DA CONSERVAÇÃO DA MASSA	50
3.3.2	EQUAÇÃO DA CONSERVAÇÃO DA ENERGIA	52
3.4	REGENERADOR	54
3.4.1	FASE EMULSÃO	55
3.4.2	FASE BOLHA	59
3.5	MODELO DAS VÁLVULAS E LINHAS DE COMUNICAÇÃO	61
3.6	MODELO DE CONTROLE	63
4	METODOLOGIA DE SOLUÇÃO	66

4.1	SOLUÇÃO DO MODELO DO <i>RISER</i>	66
4.1.1	SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DA SEÇÃO DE VAPORIZAÇÃO	66
4.1.2	SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DA SEÇÃO DE ESCOAMENTO	66
4.1.3	CORREÇÃO DA PRESSÃO NA SEÇÃO DE VAPORIZAÇÃO	74
4.1.4	CRITÉRIO DE CONVERGÊNCIA DO MODELO DO <i>RISER</i>	74
4.2	ALGORITMOS DE SOLUÇÃO	75
4.2.1	ALGORITMO DE SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES NO <i>RISER</i>	75
4.3	SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES NO REATOR E NO REGENERADOR	78
4.3.1	SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DO REATOR	78
4.3.2	SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DO REGENERADOR	79
4.4	INTEGRAÇÃO DAS SOLUÇÕES	81
5	VERIFICAÇÃO DOS MODELOS DO <i>RISER</i> E DO CONVERSOR	84
5.1	VERIFICAÇÃO DO MODELO DO <i>RISER</i>	84
5.1.1	ESCOLHA DO TAMANHO DA MALHA E DO CRITÉRIO DE CONVERGÊNCIA	86
5.2	VERIFICAÇÃO DO MODELO DO CONVERSOR	93
5.2.1	ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DO PASSO DE TEMPO	93
5.2.2	INDEPENDÊNCIA DAS CONDIÇÕES INICIAIS	94
5.2.3	COMPARAÇÃO EM REGIME ESTACIONÁRIO	96
6	POTENCIALIDADES DOS MODELOS DO <i>RISER</i> E DO CONVERSOR	101
6.1	POTENCIALIDADES DO MODELO DO <i>RISER</i>	101
6.2	POTENCIALIDADES DO MODELO DO CONVERSOR	108
6.2.1	COMPORTAMENTO DO MODELO DURANTE O RESTABELECIMENTO DO REGIME ESTACIONÁRIO	109
6.2.2	VERIFICAÇÃO DO MODELO DE CONTROLE	114
6.2.3	CASO 1: DEGRAU NA PRESSÃO NO TOPO DO REATOR	114
6.2.4	CASO 2: DEGRAU NA TEMPERATURA NA SAÍDA DO <i>RISER</i>	116
6.2.5	CASO 3: DEGRAU NO DIFERENCIAL DE PRESSÃO ENTRE O REGENERADOR E O REATOR	118
7	CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	120
7.1	CONCLUSÕES	121
7.2	RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	121
	REFERÊNCIAS	123
	APÊNDICE A – BREVE HISTÓRICO DO CRAQUEAMENTO	126
	ANEXO A – DADOS CINÉTICOS	133

1 INTRODUÇÃO

“Aqueles que fazem pesquisa científica são os recipientes de uma cultura desenvolvida por gerações anteriores.”

Thomas S. Kuhn

1.1 CRAQUEAMENTO CATALÍTICO

Segundo a Sociedade Americana de Catálise (NACS, 2002), o craqueamento catalítico fluido é considerado uma das mais importantes conquistas da Engenharia Química do século XX. É um processo que se caracteriza por ser altamente econômico, pelo fato de aproveitar resíduos da refinaria de baixo valor comercial. Existem atualmente aproximadamente 370 unidades de Craqueamento Catalítico Fluido em refinarias ao redor do mundo, produzindo quase 9 milhões de barris de gasolina diariamente. Devido ao volume de produção, justifica-se o grande investimento aplicado em novas tecnologias e ferramentas de controle com o fim de melhorar o processo ou promover um adequado ajuste operacional. Aumento de eficiência, aliado a uma maior produção diária, pode ser convertido num ganho significativo no final de um período. Fica evidente, portanto, a importância da pesquisa no desenvolvimento de equipamentos mais eficientes e da realização de mudanças técnicas nos já existentes.

O craqueamento catalítico, ilustrado esquematicamente na figura 1, consiste nas reações de quebra das ligações entre moléculas de cadeias carbônicas de compostos pesados tais como, gasóleos e resíduos do processo de refino do petróleo. A presença de um catalisador sólido, na forma de minúsculas partículas a alta temperatura, promove a quebra das cadeias, produzindo hidrocarbonetos mais leves, com maior valor comercial.

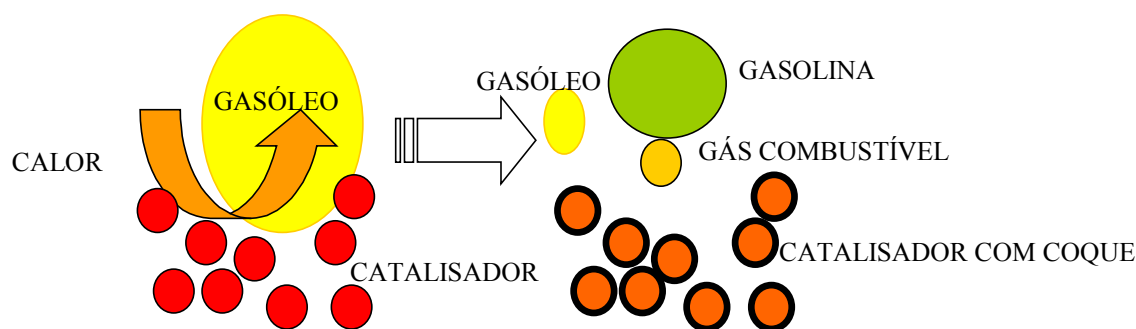


Figura 1 - Ilustração simplificada do processo de craqueamento.

O processo de craqueamento catalítico ocorre em equipamentos chamados de conversores. A Figura 2 mostra de que forma o craqueamento está inserido no processo de refino de petróleo.

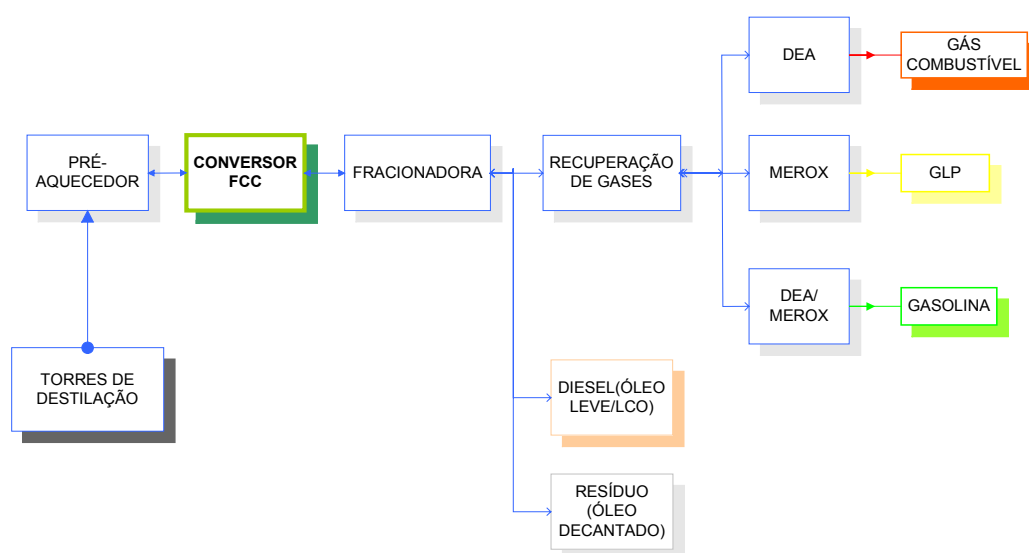


Figura 2 – Ilustração de uma planta de craqueamento catalítico.

O conversor recebe gasóleo e resíduos previamente aquecidos, provenientes das torres de destilação atmosférica e a vácuo, que são convertidos em produtos enviados a fracionadora. Deste equipamento, parte dos produtos é conduzida a uma seção de recuperação de gases, onde são separados em três frações distintas: gás combustível (moléculas contendo 1 a 2 átomos de carbono, C1 e C2), gás liquefeito (C3 e C4) e nafta de craqueamento (C5 a C12). Em seguida, passam para uma estação de tratamento químico, onde são reduzidos os teores de enxofre. O

restante dos produtos extraídos da fracionadora é composto de Gasóleo Leve de Reciclo (LCO) ou Diesel de craqueamento e resíduos, retirados da base do equipamento.

1.2 DESCRIÇÃO DO PROCESSO DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO

Um conversor FCC (Fluid Catalytic Cracking) é composto basicamente de um tubo vertical (*riser*), um vaso separador/*stripper* e um regenerador, cuja distribuição é apresentada na Figura 3. O processo de craqueamento catalítico propriamente dito ocorre no principal equipamento do conversor, o *riser*. A carga, em torno de 250°C e na forma líquida atomizada, é misturada com um catalisador sólido a alta temperatura (700°C). Os catalisadores são constituídos basicamente por um componente ativo (zeolita), por uma matriz e por ingredientes funcionais (aditivos com objetivos específicos pré-definidos). A matriz pode ser inerte (caolim), ativa (alumina) ou sintética (sílica). O catalisador é admitido na base do *riser*, com uma vazão regulada por uma válvula situada na entrada do equipamento (TCV – *Temperature Control Valve*). Ao entrar em contato com a carga, o catalisador fornece energia suficiente para sua vaporização e para as reações endotérmicas de craqueamento. Devido à alta temperatura e às propriedades catalíticas do meio, as ligações entre as moléculas da carga são quebradas, resultando em compostos mais leves e coque: O coque, um resíduo do craqueamento, consiste basicamente de cadeias carbônicas não craqueadas, metais pesados, hidrogênio e compostos aromáticos com características próximas à do grafite e é o responsável pela desativação do catalisador. Pode ser formado no processo de craqueamento (coque catalítico) ou já estar presente na carga (coque residual de carbono). O catalisador é arrastado pela carga vaporizada em consequência da variação da massa específica da fase gasosa. Sua velocidade é tal que o tempo de residência (tempo de permanência do catalisador no *riser*) é da ordem de 1 a 4s. Este tempo constitui-se num fator determinante para a obtenção de uma composição de produtos adequada. Caso as reações não fossem interrompidas ou o tamanho do *riser* fosse longo o suficiente, os produtos na saída seriam apenas carbono, metano e hidrogênio, indesejáveis para comercialização.

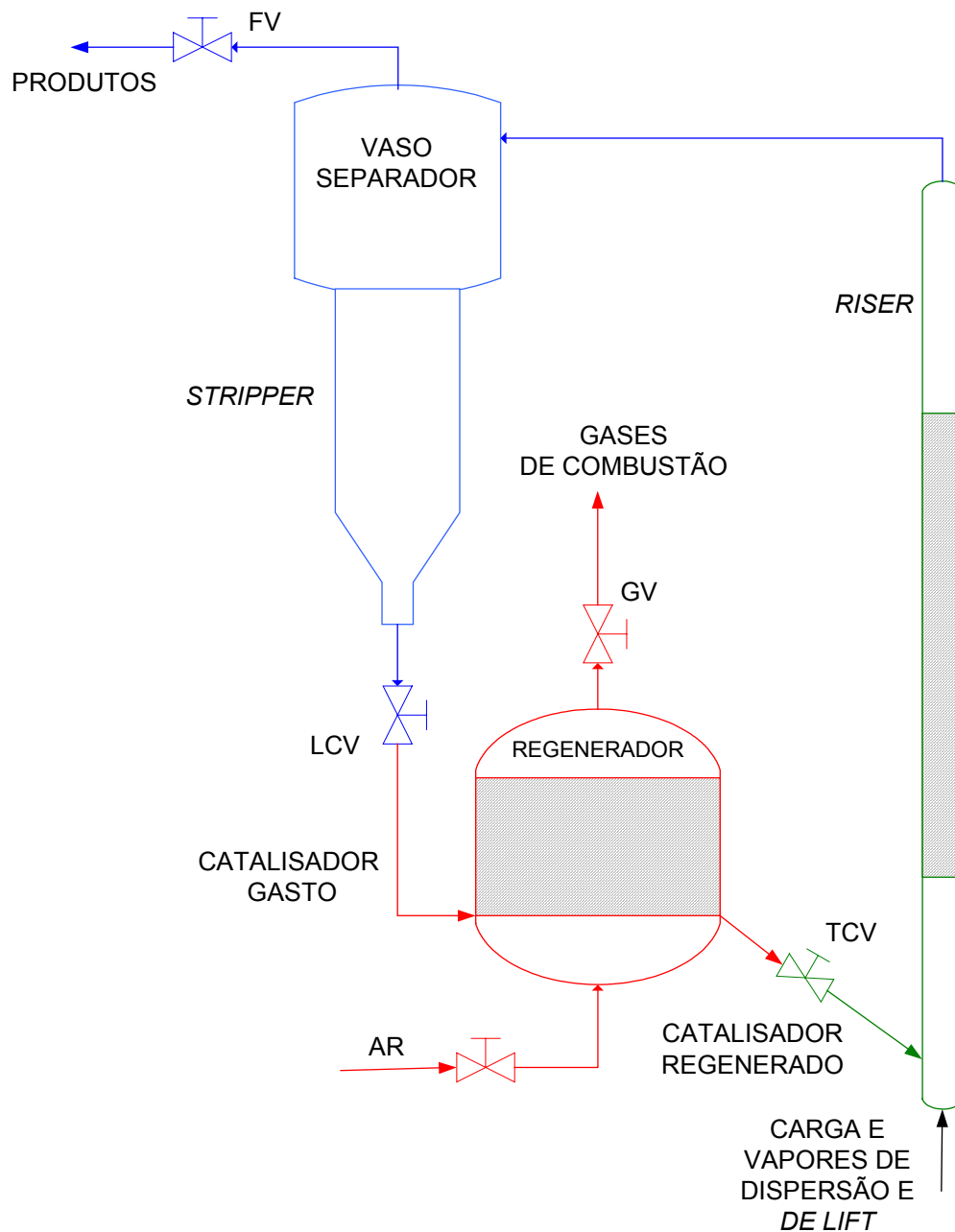


Figura 3 - Esquema simplificado de conversor FCC.

Após passar pelo *riser*, a mistura vapores-catalisador, (em torno de 530°C) segue para o vaso separador, onde os produtos são retirados pela parte superior através de ciclones. Os ciclones são dispositivos montados no interior do vaso separador, que utilizam a força centrífuga para separar o catalisador dos gases (mais leves). O catalisador, que tem sua trajetória retilínea convertida num movimento de rotação. Quando em contato com a superfície interna do ciclone e na

presença da gravidade, tem sua velocidade diminuída, provocando sua queda no leito do vaso separador. Em seguida, o catalisador dirige-se por gravidade ao *stripper*, onde sofre um processo de retificação por injeção de vapor d'água. Isto provoca a remoção da maior parte dos hidrocarbonetos remanescentes no corpo do catalisador, arrastados pela corrente ascendente de vapor d'água. Embora as reações de craqueamento ocorram no *riser*, por uma razão histórica se denomina “reator” o conjunto destes dois equipamentos: vaso separador e *stripper*. Por uma questão de praticidade, o presente trabalho adota esta expressão para se referir ao conjunto.

Em seguida, e já fora do *stripper*, as partículas de catalisador passam por uma linha de conexão e uma válvula de controle de nível de catalisador do reator, denominada LCV (*Level Control Valve*). A vazão que controla o nível do catalisador é dependente da abertura e do diferencial de pressão agindo na válvula.

O catalisador gasto (impregnado de coque) chega então ao regenerador onde o coque é queimado na presença de ar. O coque possui poder calorífico suficiente para elevar a temperatura da mistura reativa (catalisador e gases). Os gases de combustão são separados do catalisador em ciclones posicionados no topo do regenerador e enviados a uma caldeira de recuperação de gases através de uma válvula de gás (GV).

Na caldeira, os gases recebem uma quantidade extra de ar e, por meio de um conjunto auxiliar de maçaricos, o CO é convertido quase que totalmente em CO₂. Parte da energia produzida na queima é aproveitada na produção de vapor d'água, utilizado no acionamento de sopradores e compressores de gás, e o restante é empregado em outras unidades da refinaria. O catalisador, com baixo teor de coque, e portanto, com sua atividade recuperada, é devolvido ao *riser* por uma linha de transporte chamada *stand-pipe* passando através de uma válvula de controle de temperatura, TCV. Sua vazão controla indiretamente a temperatura do catalisador no topo do *riser* e é função da abertura e do diferencial de pressão entre o regenerador e o *riser*. Chegando ao *riser*, o catalisador finalmente é misturado novamente à carga de alimentação, completando assim o ciclo.

A maioria das informações inseridas nesta seção tiveram como fonte o trabalho de Abadie (1997).

1.3 MODELAGEM MATEMÁTICA

A modelagem matemática surge com o objetivo de prever o comportamento de um determinado fenômeno físico. Considerações simplificadoras podem ser feitas dependendo da complexidade do problema e do nível de precisão desejada. A atividade culmina em um conjunto de equações que podem ser resolvidas para situações diferentes, apenas variando as condições iniciais e de contorno. Enfim, as condições podem ser manipuladas dependendo do objetivo da análise, tornando o processo muito vantajoso, principalmente quando sua reprodução experimental for onerosa ou demorada. A modelagem matemática possibilita a redução do número de experimentos e explora fenômenos que não poderiam ser estudados de forma prática, mesmo porque nem todos são possíveis de serem reproduzidos em laboratório. No entanto, nada disso tem valia se hipóteses inadequadas forem adotadas e se as equações não forem representativas do processo; principal obstáculo da modelagem.

O modelo matemático resultante pode ser resolvido por métodos analíticos ou numéricos para determinar as possíveis soluções. Em algumas situações, é preciso que as soluções sejam obtidas em tempo hábil ou em consonância com a evolução do processo. Isto requer uma modelagem representativa, que seja utilizada uma plataforma computacional adequada ou que o método de solução seja suficientemente eficiente para compensar restrições de processamento.

Assim, pode-se resumir a modelagem matemática nas seguintes fases:

- Conhecimento da natureza do processo;
- Identificação das variáveis;
- Escolha das equações governantes;
- Estabelecimento das considerações devidamente justificadas, rejeitando as variáveis menos importantes;
- Definição das equações diferenciais e algébricas.

De posse das equações representativas do modelo, parte-se para a sua solução. Estas soluções podem ser analíticas ou numéricas, dependendo da natureza das equações.

O algoritmo de solução, obtido a partir da modelagem do processo, e implementado em plataformas computacional adequadas, permite a simulação e análise de casos para diferentes condições de contorno e iniciais. Isto possibilita a redução de tempo e custo de desenvolvimento de projetos cujos estudos experimentais poderiam se tornar caros e demorados em determinadas situações. A atividade de modelagem pode também alertar para perigos potenciais, avaliar a confiabilidade de projetos, além de possibilitar a análise de condições ideais, difíceis de serem reproduzidas em laboratório como o estudo de escoamentos laminares.

1.4 MODELAGEM DE FCC

As atividades ligadas ao FCC requerem o conhecimento dos fenômenos físico-químicos que nele ocorrem para poder intervir no processo de forma adequada. Este conhecimento pode ser acumulado através da observação do funcionamento das plantas industriais ou da análise de resultados, obtidos a partir de simulações de modelos matemáticos representativos.

Muitas pesquisas são realizadas com esta finalidade em unidades de menor porte, chamadas de plantas piloto. Estas plantas são especialmente construídas com o objetivo de tentar reproduzir o comportamento de uma planta industrial e a evolução dos parâmetros do processo de craqueamento catalítico. Os testes desenvolvidos nestas plantas são os mais variados possíveis, como a avaliação de catalisadores, cargas, ajustes operacionais, novos tipos de equipamentos, tais como, bicos injetores, sopradores, ciclones, válvulas, controladores, etc. Normalmente, os testes são conduzidos com as mesmas cargas, catalisadores e ajustes operacionais utilizados nas unidades de produção. Após a sua realização, os resultados são empregados para melhorar a eficiência de conversão das unidades industriais. Outra finalidade das plantas piloto consiste em prover treinamento a técnicos de plantas industriais, já que depende deles o monitoramento e ajuste dos parâmetros operacionais importantes. A desvantagem do uso das plantas experimentais reside no custo de construção, operação e manutenção, além do elevado tempo de operação.

Outra possibilidade de se conhecer melhor o processo e desta forma aumentar a eficiência de produção é através da modelagem matemática e simulação

computacional do processo. Este é certamente o maior desafio dos profissionais do setor, justificado pela dificuldade de representação dos fenômenos físico-químicos envolvidos. Além de apresentarem um grande número de variáveis, as equações são fortemente não-lineares. Dependendo da finalidade, a modelagem do FCC pode assumir vários níveis de complexidade, que serão tanto maiores quanto menos considerações forem feitas às equações governantes. Em contrapartida, o tempo computacional será bem maior para a determinação das variáveis do problema. Para o caso em que a modelagem serve de ferramenta para o acompanhamento e ajuste do processo, a capacidade de processamento das plataformas computacionais pode surgir como fator limitante.

Existe portanto uma preocupação evidente em se desenvolver modelos que aliem fidelidade ao fenômeno físico com rapidez computacional.

1.5 OBJETIVOS.

O presente trabalho tem por objetivo modelar os processos físico-químicos que se desenvolvem em um conversor FCC, e desta forma avaliar os parâmetros que representam a dinâmica do processo de craqueamento catalítico. A modelagem inclui o *riser*, o reator (vaso separador e *stripper*), o regenerador, as linhas de circulação de catalisador, incluindo as respectivas válvulas. Entretanto, uma ênfase especial é dada à determinação e solução das equações no *riser*. As seguintes informações podem ser obtidas através da solução do modelo em regime transitório:

- ✓ distribuição de velocidade e temperatura do catalisador ao longo do *riser*;
- ✓ distribuição de velocidade, pressão, temperatura, massa específica, composição, massa molecular média e conversão da fase gasosa, ao longo do *riser*;
- ✓ temperatura, pressão e nível de catalisador no reator;
- ✓ temperatura, pressão, composição dos gases de combustão e nível do regenerador;
- ✓ vazões de catalisador e de gases nas linhas de acesso do FCC.

Devido à alta não linearidade das equações, da existência de restrições, tanto operacionais como numéricas, e da necessidade de se alterar os regimes

estacionários do modelo, prevê-se a implementação de um algoritmo de controle, com atuação em válvulas posicionadas em pontos distintos da planta. Estas válvulas controlam as vazões de catalisador regenerado, catalisador gasto, ar de alimentação, gases de combustão do regenerador e produtos na saída do reator. Em consequência destes ajustes, alteram-se os valores de algumas variáveis, como as temperaturas no regenerador e na saída do *riser*, assim como os níveis de catalisador no reator e regenerador.

O presente trabalho está estruturado da seguinte forma:

O capítulo 2 descreve uma revisão bibliográfica sobre a modelagem de FCC, onde são comentados os principais aspectos abordados por pesquisadores do assunto. Estas informações servem de suporte para a definição da abordagem deste trabalho, citada no final do capítulo.

O capítulo 3 apresenta a modelagem matemática de cada componente do conversor: *riser*, reator, regenerador, linhas de catalisador e válvulas.

O capítulo 4 informa sobre a metodologia e algoritmo de solução das equações do modelo de cada equipamento e do algoritmo de solução do conversor como um todo.

O capítulo 5 apresenta uma análise numérica dos modelos do *riser* e do conversor, a fim de avaliar a confiabilidade dos métodos utilizados. Resultados comparam os resultados em regime estacionário do *riser* com um trabalho pesquisado na literatura.

O capítulo 6 apresenta resultados em regime transiente de simulações do modelo do conversor adaptado a uma planta piloto. São apresentados também os resultados da aplicação de distúrbios em determinadas variáveis e a consequência da ação de controle decorrente de *set points* pré-estabelecidos para variáveis controladas.

Encerrando o trabalho, o capítulo 7 descreve sobre as conclusões da dissertação e sugestões para trabalhos futuros.

O apêndice A descreve os principais marcos deste importante processo de refino e as razões que levaram à sua evolução e o anexo A informa sobre algumas propriedades mais importantes relacionadas à cinética do *riser*.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 HISTÓRICO DA MODELAGEM DE FCC

Procura-se modelar e simular plantas de craqueamento catalítico, utilizando ferramentas matemáticas e algoritmos de controle, com o intuito de reduzir os custos dos projetos e de encontrar alternativas para aumentar as taxas de conversão. Nota-se a evolução da modelagem de unidades FCC, quando se verifica que os trabalhos publicados buscam suplantam as deficiências dos modelos anteriores, através de propostas inovadoras ou resultantes da combinação de dois modelos potencialmente complementares.

Cabe ressaltar a diversidade de conhecimentos necessários para se elaborar um modelo que seja representativo do fenômeno físico: cinética química (combustão e reações endotérmicas), mecânica dos fluidos (conservação da quantidade de movimento e da massa), transferência de calor e termodinâmica.

O craqueamento se inicia com o contato do catalisador a alta temperatura com a carga na fase líquida atomizada. O contato provoca a vaporização da carga e a quebra de ligações das moléculas pesadas em compostos mais leves. Este mecanismo provoca a aceleração da fase gasosa, devido à variação da massa específica dos gases, e conseqüentemente o arraste da fase sólida.

O maior desafio da modelagem do escoamento no *riser* tem sido a avaliação da massa específica do gás, resultante das reações de craqueamento. Estas, no entanto, dependem das frações dos componentes da fase gasosa ao longo do processo; ponto chave da modelagem do *riser*. Diante deste desafio, surgem os primeiros modelos cinéticos como o proposto por Weekman (1968), citado em Santos (2000), que admite a fase gasosa é composta por três pseudo-componentes denominados *lumps*¹ (gasóleo, gasolina e óleo leve). Esse modelo foi estendido mais tarde para outro de dez *lumps* por Jacob et al. (1976). Outros modelos se seguiram utilizando a mesma estratégia, como o de Lee et al. (1989) de quatro

¹ Segundo Martignoni (2000), *lumps* são frações distintas ou agrupamentos de compostos de classe com características similares entre si, como massa molecular e ponto de ebulição. Segundo Juarez et al. (1997), esta é uma forma de simplificar a cinética das reações que determinam a evolução da massa molecular média da fase gasosa

lumps (gasóleo, gasolina, óleo leve e coque) e o de Corella et al. (1991) (citado por Juarez et al.(1997)) de cinco *lumps*, que acrescentou as frações pesadas. Theologos e Markatos (1993) desenvolveram um modelo matemático do escoamento em *riser*, utilizando o modelo cinético de três *lumps* de Weekman (1968), com ênfase na análise do escoamento bifásico. Martignoni (2000), baseado em dados experimentais de uma unidade piloto, apresentou uma modelagem unidimensional específica para *risers* de FCC, utilizando um modelo de seis *lumps*: LCO, gasolina, GLP, coque, gasóleo e gás combustível. Todos os modelos cinéticos dependem da obtenção das constantes de reação e energias de ativação. Muitos trabalhos foram publicados com o objetivo de se estabelecer estratégias para determinar tais valores, como o de Juarez et al.(1997).

Como as velocidades das reações endotérmicas dependem do mecanismo de transferência de calor e da quantidade de movimento entre as fases sólida e gasosa, era preciso investigar o processo de transporte das partículas pelos gases. Ding e Gidaspow (1990) e Tsuo e Gidaspow (1990) apresentaram modelos de escoamento gás-sólido baseados nas equações de Navier-Stokes, onde são mostrados os campos de velocidade ao longo de leitos fluidizados. No trabalho de Theologos e Markatos (1993), é realizada uma análise uni-dimensional no escoamento ar-sólido, a fim de validar as correlações empíricas utilizadas para o arraste e o atrito com a parede do tubo. Nesse mesmo trabalho, são feitas análises de escoamentos bi e tri-dimensionais. Kunii e Levenspiel (1997) apresentaram modelos de fluidização, analisando desde a formação de leitos até o transporte pneumático das partículas sólidas, de acordo com sua classificação na escala Geldart. Seus trabalhos tiveram grande importância para a determinação de parâmetros necessários à modelagem de regeneradores, como a altura da fase densa e a fração de vazios. Haider e Levenspiel (1988) apresentam relações para coeficientes de arraste, conforme a esfericidade das partículas e Yang (1978) discute sobre aspectos do transporte pneumático e sobre as perdas por fricção das partículas sólidas. No trabalho de Martignoni (2000), é feita uma análise do escoamento, considerando o escorregamento entre as fases, o atrito com a parede interna, o arraste e os mecanismos de transferência de calor. O processo de evaporação da carga é gradativo e a dinâmica de formação dos seis *lumps* é modelada pela equação de

conservação das espécies, que contempla as taxas de evaporação da carga e as taxas das reações, funções das respectivas constantes de reação de cada *lump*.

Assim como para o *riser*, outros trabalhos foram apresentados com a finalidade de estudar outros componentes da planta de FCC. Citados por Ellis e Riggs (1998), Ford et al. (1976) desenvolveram um modelo detalhado da cinética de combustão no regenerador e Lee e Groove (1985) apresentaram um modelo do reator e do regenerador. Ellis e Riggs (1998) combinaram o simulador dinâmico apresentado por McFarlane et al. (1990) com os modelos de dez *lumps* de Jacob et al. (1976) e Arbel et al. (1995) para o *riser*, aplicado a uma unidade FCC Modelo IV.

A modelagem de todo o conversor surgiu a partir da necessidade de controle das plantas. McFarlane et al. (1990) desenvolveram um modelo voltado para a análise da variação de determinados parâmetros potenciais para controle, com equações diferenciais ordinárias contemplando apenas variações temporais. Entretanto, abriu-se mão de uma análise detalhada dos componentes, com o objetivo de reduzir o esforço computacional. O modelo do *riser* não contempla a cinética de conversão da carga, e por isso, o balanço de energia, que é fortemente afetado pelas reações endotérmicas de craqueamento, fica comprometido. O regenerador é modelado segundo duas regiões: uma densa e outra diluída, sendo analisados como CSTR's (*Continuous Stirred Tank Reactor* - Reator Tanque de Mistura Contínua), ou seja, como meios contínuos e homogêneos. O modelo prevê aplicação de perturbações nas temperaturas da carga e do ambiente, na tendência de formação de coque da carga e no ajuste do diferencial de pressão entre o reator e o regenerador.

As etapas de partida (*start up*) e parada (*shut down*) são procedimentos importantes na simulação e controle de plantas de FCC. Zheng (1994) modela estes procedimentos transitórios com um modelo cinético de cinco *lumps*. Os resultados do regime estacionário são comparados aos de uma planta industrial e a comparação se mostra satisfatória.

Os modelos foram então evoluindo, agregando novas técnicas ou conceitos, como os propostos por Ali e Rohani (1997) na modelagem e simulação de unidades FCC. Este trabalho considerou a cinética de quatro *lumps*, desenvolvida por Lee et al. (1989), em regime pseudo-estacionário. O modelo de fluidização no regenerador

foi baseado nos conceitos desenvolvidos por Kunii e Levenspiel (1997). O regenerador foi dividido em duas regiões: densa e diluída, mas ignora os efeitos da fase diluída na eficiência do equipamento. A solução do modelo dinâmico foi obtida através de um procedimento iterativo, usando o método de Newton-Raphson para resolver as equações algébricas não lineares. As equações diferenciais ordinárias foram resolvidas numericamente pelo método de Runge-Kutta de quarta ordem.

Arbel et al. (1995) apresentam um trabalho de modelagem dinâmica para controle de conversores de unidades FCC que emprega o modelo de dez *lumps* de Jacob et al. (1976) para o *riser*. Não há deslizamento entre as fases e nem variação de massa e calor específicos da mistura gasosa. Neste trabalho, é ressaltada a importância de se prever com exatidão a composição dos gases de combustão, coque no catalisador e massa específica do catalisador. Estes parâmetros influenciam diretamente no comportamento dos demais componentes do conversor. Os resultados relacionam as temperaturas no *riser* e no regenerador, a conversão, o teor de coque no catalisador regenerado, a gasolina e os gases formados, com a razão catalisador/óleo, para determinadas relações ar/óleo. O trabalho de Arbel et al. (1995) tornou-se um marco importante, pois apresentou um modelo bem fundamentado com pouquíssimas equações empíricas, embora tenha ignorado a variação da massa específica da mistura reacional (Lansarin, 1997). Outros modelos são apresentados com a finalidade de estudar o comportamento de parâmetros em regime estacionário. Lansarin (1997), por exemplo, faz este tipo de análise modelando um conversor utilizando a cinética de dez *lumps*. O *riser* é considerado adiabático e o escoamento como *plug flow*. O conjunto de equações diferenciais ordinárias do *riser* foi resolvido com o uso do pacote numérico LSODE (*Livermore Solver For Ordinary Differential Equations*). No caso do regenerador, foi utilizado o pacote numérico *Homotopy*, desenvolvido por Secchi e Lage (1988), citado naquele trabalho, para a solução de sistemas não lineares.

Maya et al. (1998) apresentam um método teórico preliminar de análise de controle de unidades FCC industriais, onde é utilizado um modelo de cinco *lumps*: gasóleo pesado, gasóleo leve, gasolina, gases voláteis e coque. Assim como em McFarlane et al. (1990), eles analisam o comportamento de determinadas variáveis

quando da aplicação de perturbações nas vazões de catalisador e de ar de combustão.

Os autores deixaram evidente que o regenerador e o *riser* eram os equipamentos de maior importância para a fidelidade dos modelos, devido à complexidade das reações químicas. Entretanto, a planta só se tornaria representativa de um sistema real se o reator (conjunto vaso separador/*stripper*) fosse incluído nos modelos. Arandes et al. (2000) propuseram um trabalho de modelagem da planta de FCC incluindo o vaso separador/*stripper*, no interior do qual as propriedades são consideradas uniformes, sem ocorrência de reações químicas.

Outros trabalhos se seguiram com o objetivo de modelar a dinâmica do processo incluindo o reator. Santos (2000), por exemplo, modela uma Unidade FCC modelo STACKED, do fabricante UOP. Nele, e assim como em muitos outros trabalhos, a modelagem do *riser* considera que a carga é craqueada em dez *lumps*: parafinas leves e pesadas, naftenos leves e pesados, anéis aromáticos leves e pesados, cadeias laterais ligadas a anéis aromáticos leves e pesados, gasolina e coque. O trabalho considera também a circulação de catalisador através das válvulas de controle de vazão. O regenerador é modelado em duas regiões: a densa, subdividida nas fases bolha e emulsão e a outra, a diluída; todas analisadas como CSTRs. Para resolver as equações, Santos implementou o modelo em linguagem C e utilizou o programa Matlab (V 4.2) para resolvê-lo numericamente. Foi utilizado o método de integração de Adams/Gear, sendo que para o *riser* foi aplicado o método das diferenças finitas. Han e Chung (2000) modelaram um conversor *side-by-side* (vide Figura 54) considerando a cinética de quatro *lumps* para o *riser*: gasóleo, gasolina, coque e gases com cadeias de um a 4 átomos de carbono. A vaporização na base do *riser* é admitida instantânea e a temperatura resultante da mistura com o catalisador é a de saturação da carga. A equação da conservação da quantidade de movimento é utilizada por prever velocidades relativas entre as fases. Segundo os autores, a inclusão do deslizamento entre as fases reduz em 10% os erros na previsão da taxa de conversão. O regenerador é analisado como um componente híbrido, onde o modelo CSTR é aplicado às equações da energia e o modelo unidimensional para a composição da fase gasosa. Considera-se a existência de duas regiões: a densa e a diluída, sendo a densa sub-dividida em duas

fases: bolha e emulsão. As equações algébricas não lineares do modelo são resolvidas pelo algoritmo híbrido de Powell baseado no método de Newton. O algoritmo de Pezold-Gear foi usado para resolver o problema do acoplamento das equações da conservação da massa e da quantidade de movimento no *riser* e uma rotina baseada no algoritmo de Gear foi empregada para resolver as equações diferenciais ordinárias. Malay et al. (1999) utilizam o modelo *plug flow* para o *riser* e consideram que a velocidade da fase gasosa é o dobro da fase sólida (fator de escorregamento 2 - Braca e Fried (1956), citado naquele trabalho) e admitem regime quase-estático na evolução dos parâmetros. O reator é modelado como CSTR, com o catalisador na condição de mínima fluidização e o vapor de lavagem de hidrocarbonetos não influenciando no balanço energético. O regenerador é composto por duas fases distintas: a bolha, modelada como *plug flow* e sem partículas sólidas, e a emulsão modelada como um CSTR. A diferença de modelos entre as fases se justifica pelo fato de que o tempo de residência da bolha no leito está na ordem de 6 a 7s, enquanto que na fase emulsão do regenerador chega a 30 min. As fases trocam calor e massa entre si. As equações do *riser* e do reator são resolvidas utilizando o método de Runge-Kutta de quarta ordem e as do regenerador através de um código de Cohen e Hindmarsh (1994,1996), citados naquele trabalho.

2.2 PRESENTE TRABALHO

Tendo como base na evolução da modelagem de conversores, o presente trabalho propõe um modelo dinâmico de um conversor FCC com ênfase na modelagem e solução das equações do *riser* utilizando um algoritmo que alie as seguintes características:

- ✓ reduzido tempo de processamento
- ✓ fidelidade ao fenômeno físico.

A fim de atingir estes objetivos, cada equipamento é modelado de acordo com as seguintes considerações:

Riser

O escoamento no *riser* é do tipo *plug flow*, quase-estacionário e particulado, envolvendo duas fases distintas: uma sólida e outra gasosa. Existe um movimento

relativo entre as fases e admite-se vaporização instantânea da carga. O *riser* é adiabático e considera-se a transferência de calor da fase sólida para a gasosa. As reações de craqueamento são representadas através da aplicação do modelo cinético de quatro *lumps* de Han e Chung (2000), cujos detalhes serão mostrados no item 3.2.2.

Reator (conjunto vaso separador/stripper)

O reator é modelado como um CSTR adiabático com acúmulo de massa, onde não ocorrem reações químicas. O modelo e o algoritmo de solução deste equipamento são os mesmos utilizados no trabalho de dissertação de Melo (2003).

Regenerador

O regenerador é considerado como um leito fluido borbulhante, sem arraste de partículas sólidas, composto de uma região densa dividida em duas fases: bolha e emulsão, ambas modeladas como CSTR's. Devido à existência de um potencial térmico e de concentração de gases (CO, CO₂, O₂, H₂O, N₂), prevê-se trocas de energia e de massa entre as fases. Em consequência disto, são avaliadas as pressões e temperaturas, admitindo que exista equilíbrio térmico entre sólidos e gases na fase emulsão. O modelo e o algoritmo de solução deste equipamento são os mesmos utilizados no trabalho de dissertação de Penteado (2003).

Linhas de circulação de catalisador

O catalisador nas linhas de circulação é modelado considerando uma coluna estática entre os equipamentos e as válvulas LCV, TCV. As vazões nas válvulas são calculadas em função do diferencial de pressão e da abertura das válvulas.

O capítulo 3 descreve os modelos de cada componente, representados pelas equações governantes, desenvolvidas em função das considerações aplicadas a cada caso. O capítulo 4 apresenta a metodologia de solução das equações representativas de cada equipamento e a forma como cada algoritmo é implementado. A seção culmina com a apresentação do algoritmo que integra a solução dos modelos de cada componente.

O capítulo 5 trata da verificação dos modelos do *riser* e do conversor. Para o modelo do *riser*, é feita uma análise de sensibilidade de malha espacial, em relação

ao critério de convergência. No caso do conversor, é feita uma análise de sensibilidade de passo de tempo e testes de verificação de regime estacionário e de independência das condições iniciais.

O capítulo 6 apresenta as potencialidades dos modelos do *riser* e do conversor. Para o *riser*, são apresentados gráficos com a variação das velocidades e temperaturas das fases sólida e gasosa assim como a variação da pressão e massa molecular da fase gasosa. É feita também uma análise de sensibilidade de algumas variáveis. As potencialidades do modelo do conversor são exploradas apresentando inicialmente o comportamento transiente das principais variáveis. Em seguida, são apresentados os resultados de simulações de três degraus em variáveis controladas.

O capítulo 7 encerra o trabalho, apresentando as principais conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

3 MODELAGEM

3.1 INTRODUÇÃO

O modelo proposto tem por fim descrever dinamicamente os fenômenos físico-químicos que se desenvolvem no conversor com ênfase especial na determinação das equações representativas do escoamento ao longo do *riser*. Para o reator e para o regenerador são utilizados os modelos de Melo (2003) e Penteado (2003), respectivamente. As linhas de comunicação entre os equipamentos, representadas basicamente pelos modelos das válvulas, são contempladas por uma mesma equação cujas constantes são pré-estabelecidas em função da sensibilidade de cada válvula. A seguir, são apresentados os modelos de cada componente do conversor, resultantes da aplicação das equações da conservação da massa, das espécies químicas, da quantidade de movimento e da energia.

3.2 MODELO DO RISER

O modelo do *riser* não considera perdas de calor para o meio externo, portanto, é adiabático. Com ilustrado na Figura 4, o modelo prevê a existência de duas regiões distintas: uma situada na base do equipamento, que representa o processo de vaporização da carga, modelado como um CSTR e a outra compreende o escoamento bifásico ao longo do *riser*, analisado de forma discreta sobre elementos convenientemente distribuídos.

Assume-se que as reações de craqueamento e o escoamento no *riser* ocorrem muito rapidamente quando comparado aos processos no reator e no regenerador. Desta forma, o processo no *riser* é assumido quase-estático, ou seja, qualquer alteração nos contornos do *riser* (vazões, temperaturas e pressões) modifica imediatamente o escoamento e o craqueamento. Sendo assim, as variações no tempo são desprezadas nas equações de conservação.

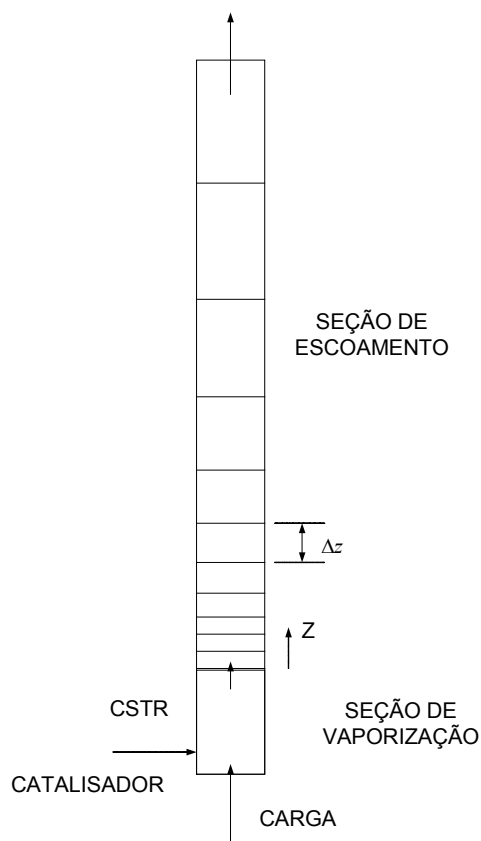


Figura 4 – Desenho esquemático do modelo do *riser*

Para a determinação das propriedades na seção de vaporização, faz-se uso do esquema ilustrado na Figura 5.

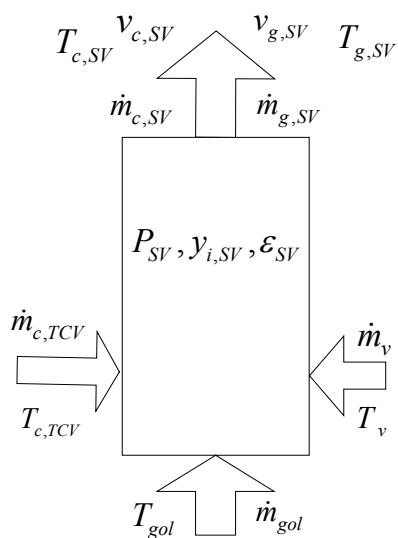


Figura 5 - Desenho esquemático da seção de vaporização.

A seção de vaporização é considerada um CSTR, já que o contato do catalisador quente com o gasóleo provoca a sua vaporização instantânea. Esta aproximação foi feita por Ali e Rohani (1997), citando que apenas 3% do tempo de residência no *riser* são suficientes para que isto aconteça. Uma representação mais fiel ao fenômeno requer modelos mais sofisticados e complexos, o que foge ao objetivo deste estudo. Como a análise não é dinâmica, considera-se que a temperatura da fase gasosa na seção de vaporização ($T_{g,SV}$), após o contato com o catalisador, seja a de saturação na pressão do local (P_{SV}) e dada pela equação de Antoine (Reid et al., 1987):

$$T_{g,SV} = \frac{B}{\left[A - \log_{10} \left(P_{SV} y_{go,SV} \right) \right]} - C \quad (1)$$

onde $y_{go,SV}$ é a fração de gasóleo em relação a massa total de fluido na seção de vaporização. A , B e C são constantes definidas em função da temperatura média de ebulição da carga. Com esta temperatura, aplica-se um balanço de energia para se avaliar a temperatura da fase sólida $T_{c,SV}$, resultando em

$$T_{c,SV} = T_{c,TCV} - \frac{\dot{m}_{go}}{\dot{m}_{c,TCV} c_{pc}} \left[c_{p_{gol}} (T_{g,SV} - T_{gol}) + \Delta H_{v_{gol}} + \dot{m}_v \frac{c_{pv}}{\dot{m}_{go}} (T_{g,SV} - T_v) \right] \quad (2)$$

onde $\dot{m}_{go}$, $\dot{m}_v$ e $\dot{m}_{c,TCV}$ são as vazões de gasóleo vaporizado, de vapor de *lift* e dispersão e de catalisador, respectivamente. As temperaturas T_{gol} , T_v e $T_{c,TCV}$ correspondem às temperaturas do gasóleo líquido, do vapor e do catalisador, respectivamente. $c_{p_{gol}}$, c_{pv} e c_{pc} são os calores específicos do gasóleo líquido, do vapor e do catalisador (considerado constante), respectivamente. Ao serem colocados em contato, o catalisador cede calor ao gasóleo líquido atomizado, que é admitido no local através de bicos injetores. Este, recebendo calor do catalisador, imediatamente transforma-se em vapor pela absorção do calor latente $\Delta H_{v_{gol}}$. Da mesma forma, o vapor d'água recebe calor sensível atingindo a temperatura final $T_{g,SV}$. O vapor d'água injetado na seção de vaporização é composto de duas

correntes: uma de *lift*, cuja finalidade é a de arrastar o catalisador principalmente na etapa de partida e de aquecimento, e outra para a dispersão da carga, com o fim de reduzir o tamanho das gotículas de gasóleo, aumentando assim a área de contato com o catalisador. Conhecidos os valores da pressão e da temperatura, aplica-se a equação dos gases perfeitos para se avaliar a massa específica da fase gasosa ($\rho_{g,SV}$):

$$\rho_{g,SV} = \frac{P_{SV} M_{wg,SV}}{\bar{R} T_{g,SV}} \quad (3)$$

onde $M_{wg,SV}$ é a massa molecular média dos gases na seção de vaporização. Como não se tem informação da dinâmica da mistura nesta seção, considera-se que a fração de vazios, $\varepsilon_{g,SV}$, é a mesma observada na linha de circulação de catalisador à jusante da TCV ($\varepsilon_{g,TCV}$) (Han e Chung, 2000).

A fração de sólidos $\varepsilon_{c,SV}$ é calculada do complemento da fração da fase gasosa:

$$\varepsilon_{c,SV} = 1 - \varepsilon_{g,SV} \quad (4)$$

A equação da conservação da massa em regime estacionário é aplicada, então, para se determinar a velocidade de cada fase:

$$v_{c,SV} = \frac{\dot{m}_{c,TCV}}{\rho_c \varepsilon_{c,TCV} A_{RS}} \quad (5)$$

para a fase sólida, e

$$v_{g,SV} = \frac{\dot{m}_{go}}{\rho_g \varepsilon_{g,TCV} A_{RS}} \quad (6)$$

para a fase gasosa. A_{RS} é a área da seção transversal do *riser*, ρ_c é a massa específica do catalisador, admitida constante e ρ_g a massa específica do gás.

No momento em que a carga de gasóleo é colocada em contato com o catalisador, assume-se que não ocorrem reações de craqueamento. Assim, não há variação das frações de gasolina, $y_{gl,SV}$, e gás combustível, $y_{gc,SV}$, ou seja,

$$y_{gl,SV} = 0 \quad (7)$$

e

$$y_{gc,SV} = 0. \quad (8)$$

Para simplificar a modelagem da cinética ao longo do *riser*, o carbono presente na carga Y_{cc} (carbono Conradson, coque que ocorre naturalmente na carga e que não é produto de craqueamento, Santos (2000)) é transformado em coque e se deposita sobre o catalisador assim que entra na seção de vaporização. Logo,

$$y_{go,SV} = \frac{\dot{m}_{go}}{\dot{m}_g}, \quad (9)$$

onde $\dot{m}_g$ é a vazão da fase gasosa. A vazão de gasóleo é a vazão da fase gasosa a menos das vazões de coque presente na carga e do vapor de *lift* e de dispersão injetados na base do *riser*. Assim,

$$\dot{m}_{go} = \dot{m}_g - \dot{m}_{gol}Y_{cc} - \dot{m}_v; \quad (10)$$

e combinando a equação (10) com a (9), tem-se que

$$y_{go,SV} = 1 - \frac{\dot{m}_{gol}Y_{cc} + \dot{m}_v}{\dot{m}_g}; \quad (11)$$

Da mesma forma, a fração de coque da carga vaporizada é dada por,

$$y_{cq,SV} = \frac{\dot{m}_{gol}Y_{cc}}{\dot{m}_g}. \quad (12)$$

Para a determinação das equações representativas do escoamento à jusante da seção de vaporização são consideradas duas fases distintas: uma sólida (catalisador) e outra gasosa (gasóleo) com movimento relativo entre si e ilustradas esquematicamente na Figura 6. Estas fases interagem, trocando energia (calor), quantidade de movimento e massa (coque). A troca de energia é provocada pela diferença de temperatura entre as fases. As interações de quantidade de movimento são garantidas pela existência de forças de campo (gravidade) e de superfície (atrito entre as fases). A energia vinda da fase sólida supre as reações de craqueamento provocando transformações nos componentes (*lumps*) da fase gasosa. O modelo

proposto considera o escoamento unidimensional (Theologos e Markatos, 1997) e compressível.

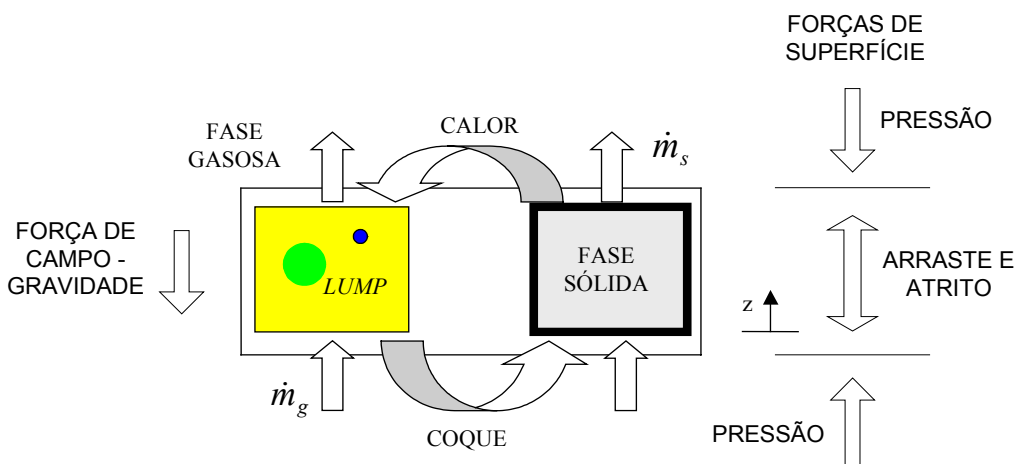


Figura 6 - Esquema das interações de massa, energia e quantidade de movimento entre as fases sólida e gasosa em um volume de controle infinitesimal.

Conforme Lansarin (1997), a variação da massa específica da fase sólida é desprezada, mesmo com a deposição de coque vindo da fase gasosa. A massa específica da fase gasosa varia com a composição, a temperatura e a pressão e as reações que ocorrem no *riser* são, na maior parte endotérmicas (Lee et al., 1989). Em função do tempo de residência no *riser* ser muito menor que no reator e no regenerador, admite-se, assim como Han e Chung (2000), que as reações variam apenas no espaço. Desta forma, o modelo responde imediatamente a qualquer variação temporal das condições de contorno. Os itens que se seguem têm por objetivo obter as equações representativas do escoamento através de análise diferencial.

3.2.1 CONSERVAÇÃO DA QUANTIDADE DE MOVIMENTO

Para a determinação das equações da velocidade das fases, faz-se uma análise diferencial aplicada sobre o volume infinitesimal ilustrado na Figura 7 onde observa-se a existência das duas fases submetidas às forças de campo e de superfície.

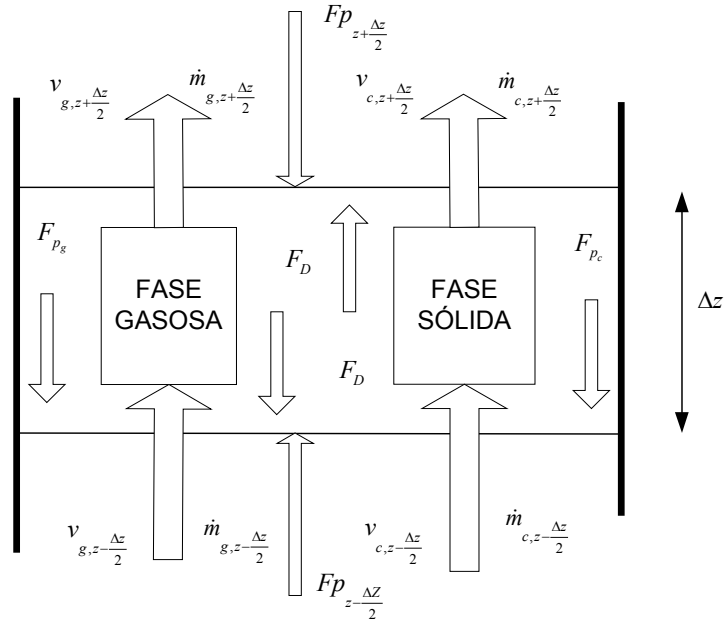


Figura 7 - Esquema das interações de quantidade de movimento entre as fases sólida e gasosa em um volume de controle infinitesimal.

A força de campo é a gravitacional e as forças de superfície compreendem as forças de arraste entre as fases (F_D), as forças de atrito destas com a parede interna F_{ps} e F_{pc} e a de pressão (F_P). Como a variação da quantidade de movimento é consequência das forças que atuam no volume, pode-se escrever que

$$-(\dot{m}_j v_j)_{z-\frac{\Delta z}{2}} + (\dot{m}_j v_j)_{z+\frac{\Delta z}{2}} = (PA_{RS}\varepsilon_j)_{z-\frac{\Delta z}{2}} - (PA_{RS}\varepsilon_j)_{z+\frac{\Delta z}{2}} - \rho_j g \varepsilon_j - \tau_{pj} \pi d_{RS} \varepsilon_j \Delta z \pm F_D A_{RS} \Delta z \varepsilon_c. \quad (13)$$

A soma dos dois termos do lado esquerdo da equação representam a variação da quantidade de movimento entre as duas faces do volume, onde v_j é a velocidade e $\dot{m}_j$ a vazão mássica da fase j . z é a posição do volume de controle no *riser*. Os dois primeiros termos do lado direito correspondem às forças de pressão aplicadas em cada face, onde ε_j é a fração volumétrica. O terceiro termo representa a influência da gravidade, onde ρ_j é a massa específica da fase j e g , a aceleração da gravidade. O quarto termo representa a força de atrito entre a fase e a superfície interna do *riser*, onde d_{RS} é o diâmetro interno do *riser*. τ_{pj} é a tensão de cisalhamento junto à parede (Han e Chung, 2000, Martignoni, 2000 e Yang, 1978) representada por

$$\tau_{pj} = \frac{1}{2} f_{pj} \varepsilon_j v_j^2, \quad (14)$$

onde f_{pj} é o fator de atrito. Para a fase gasosa e números de Reynolds (Re_g) compreendidos entre 2100 e 10^5 , tem-se

$$f_{pg} = \frac{0,0791}{Re_g^{0.25}}, \quad (15)$$

e para Re_g maiores que 10^5 , tem-se

$$f_{pg} = 0,0008 + 0,0552 Re_g^{-0.237}. \quad (16)$$

Para a fase sólida

$$f_{pc} = \frac{0,051}{v_c} \quad (17)$$

O quinto termo da equação (13) representa a força de arraste entre as fases, definida por unidade de volume da fase sólida. A força F_D é determinada de acordo com Theologos e Markatos (1993) e Tsuo e Gidaspow (1990):

$$F_D = \rho_g \varepsilon_c C_D |v_g - v_c| (v_g - v_c) \rho_c \frac{\varepsilon_g^{-2.65}}{\varphi(\rho_c - \rho_g) d_p} \quad (18)$$

onde ρ_g e ρ_c são as massas específicas, ε_g e ε_c , as frações volumétricas e v_g e v_c , as velocidades das fases gasosa e sólida, respectivamente. d_p é o diâmetro da partícula, assumida como sendo perfeitamente esférica, ou seja, esfericidade φ é igual a 1. O coeficiente de arraste C_D foi definido por Haider e Levenspiel (1989) como sendo,

$$C_D = \frac{24}{Re} \left[1 + 8,1716 e^{-4,0655\varphi} \right] \left[Re^{0,0964+0,5565\varphi} \right] + \frac{73,69 Re e^{-5,0748\varphi}}{Re + 5,378 e^{6,2122\varphi}} \quad (19)$$

que apresenta bons resultados para esfericidades maiores que 0,67. Re é o número de Reynolds do escoamento:

$$Re = \frac{\rho_g d_p |v_g - v_c| \varepsilon_g}{\mu_g} \quad (20)$$

e μ_g é a viscosidade dinâmica da fase gasosa, que é função da temperatura.

Desenvolvendo os termos do lado esquerdo da equação (13) em séries de Taylor, desprezando os termos de terceira ordem, tem-se,

$$(\dot{m}_j v_j)_{z+\frac{\Delta z}{2}} = (\dot{m}_j v_j)_z + \frac{\partial(\dot{m}_j v_j)}{\partial z} \frac{\Delta z}{2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2(\dot{m}_j v_j)}{\partial z^2} \left(\frac{\Delta z}{2}\right)^2 + \dots \quad (21)$$

e

$$(\dot{m}_j v_j)_{z-\frac{\Delta z}{2}} = (\dot{m}_j v_j)_z - \frac{\partial(\dot{m}_j v_j)}{\partial z} \frac{\Delta z}{2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2(\dot{m}_j v_j)}{\partial z^2} \left(\frac{\Delta z}{2}\right)^2 + \dots \quad (22)$$

De forma similar, expandindo em séries de Taylor os termos de pressão da equação (13), tem-se:

$$(PA_{RS}\varepsilon_j)_{z+\frac{\Delta z}{2}} = (PA_{RS}\varepsilon_j)_z + \frac{\partial(PA_{RS}\varepsilon_j)}{\partial z} \frac{\Delta z}{2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2(PA_{RS}\varepsilon_j)}{\partial z^2} \left(\frac{\Delta z}{2}\right)^2 + \dots \quad (23)$$

$$(PA_{RS}\varepsilon_j)_{z-\frac{\Delta z}{2}} = (PA_{RS}\varepsilon_j)_z - \frac{\partial(PA_{RS}\varepsilon_j)}{\partial z} \frac{\Delta z}{2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2(PA_{RS}\varepsilon_j)}{\partial z^2} \left(\frac{\Delta z}{2}\right)^2 + \dots \quad (24)$$

Substituindo estas equações na equação (13) e desenvolvendo, chega-se à equação da conservação da quantidade de movimento aplicada às fases gasosa e sólida:

$$\frac{d(\rho_j \varepsilon_j v_j^2)}{dz} = -\frac{d(P\varepsilon_j)}{dz} - \rho_j g \varepsilon_j - \frac{4\tau_{pj} \varepsilon_j}{d_r} \pm F_D \varepsilon_c, \quad (25)$$

onde os quatro termos do lado direito representam as influências da queda da pressão, gravidade, forças viscosas e arraste respectivamente em cada fase j .

3.2.2 EQUAÇÃO DA CONSERVAÇÃO DA ENERGIA

A temperatura da fase gasosa é determinada através dos fluxos de energia pelas faces do volume de controle, das trocas de calor entre as fases sólida e gasosa e da geração de energia necessária nas reações de craqueamento.

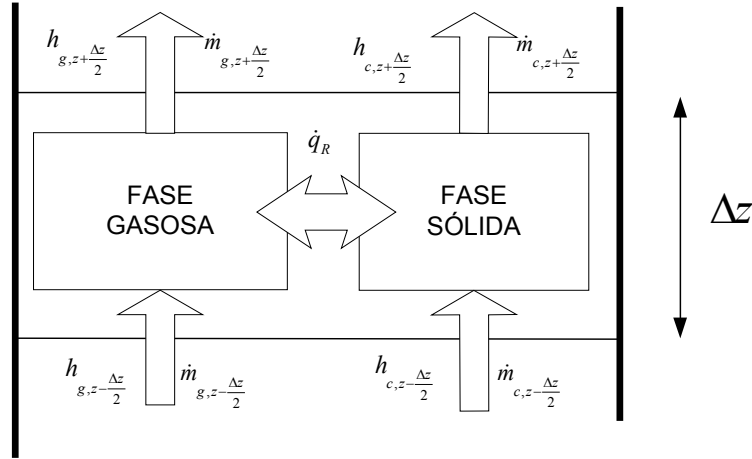


Figura 8 - Esquema das interações de energia entre as fases sólida e gasosa em um volume de controle infinitesimal.

Aplicando um balanço de energia na fase gasosa no volume de controle da Figura 8, tem-se:

$$(\dot{m}_{g,RS} h_g)_{z-\frac{\Delta z}{2}} - (\dot{m}_{g,RS} h_g)_{z+\frac{\Delta z}{2}} + \dot{q}_R dm_{g,RS} + \alpha(T_c - T_g)A_p = 0 \quad (26)$$

onde T_g e T_c são as temperaturas das fases gasosa e sólida, respectivamente.

Os dois primeiros termos da equação correspondem aos fluxos de energia transportados pela fase gasosa ao longo do escoamento, onde $\dot{m}_{g,RS}$ é a vazão mássica da fase gasosa e h_g é a entalpia da fase gasosa. O terceiro termo é a energia gerada nas reações de craqueamento onde $\dot{q}_R$ é o calor originado nas reações endotérmicas por unidade de massa e dm_g é a massa de gases no volume infinitesimal. O quarto termo representa a transferência de calor entre as fases, onde A_p é a área superficial das partículas de catalisador e α é o coeficiente de transferência de calor por convecção, entre a superfície do catalisador e a fase gasosa, definido por Kunii e Levenspiel (1997) e citado em Han e Chung (2001) como:

$$\alpha = 0,03 \frac{k_g}{d_p^{2/3}} \left[\frac{|v_g - v_c| \rho_g \varepsilon_g}{\mu_g} \right]^{1/3} \quad (27)$$

onde k_g é a condutividade térmica da fase gasosa que é uma função da massa molecular média, M_{wg} , e da temperatura da fases gasosa, T_g :

$$k_g = 10^{-6} (1,9469 - 0,374M_{wg} + 1,4815 \times 10^{-3} M_{wg}^2 + 0,1028T_g). \quad (28)$$

Esta equação foi utilizada por Han e Chung (2000) e originada do API *technical data book* (Technical Data Commitee, 1988).

Expandindo os termos da equação (26) numa série de Taylor, resulta em:

$$(\dot{m}_{g,RS} h_g)_z - \frac{\partial(\dot{m}_{g,RS} h_g)_z}{\partial z} \frac{\Delta z}{2} (\dot{m}_{g,RS} h_g)_z - \frac{\partial(\dot{m}_{g,RS} h_g)_z}{\partial z} \Delta z + \dot{q}_R dm_{g,RS} + \alpha(T_c - T_g) A_p = 0. \quad (29)$$

Substituindo estas expansões na equação (26), obtém-se:

$$\frac{\partial(\dot{m}_{g,RS} h_g)_z}{\partial z} \Delta z = \dot{q}_R dm_{g,RS} + \alpha(T_c - T_g) A_p, \quad (30)$$

Aplicando a regra da cadeia:

$$\left(\frac{\partial \dot{m}_{g,RS}}{\partial z} h_g)_z + \dot{m}_{g,RS} \frac{\partial h_g)_z}{\partial z} \right) \Delta z = \dot{q}_R dm_g + \alpha(T_c - T_g) A_p. \quad (31)$$

Como não há acúmulo de massa ao longo do *riser*, o primeiro termo do lado esquerdo da equação (31) se anula, ficando apenas:

$$\frac{\partial h_g}{\partial z} \Delta z = \frac{1}{\dot{m}_{g,RS}} \left[\dot{q}_R dm_{g,RS} + \alpha(T_c - T_g) A_p \right] \quad (32)$$

A forma infinitesimal, dm_g , pode ser definida como:

$$dm_{g,RS} = \rho_g \varepsilon_g A_{RS} \Delta z \quad (33)$$

Definindo A_e como a soma da área superficial de todas as partículas de catalisador por unidade de volume, pode-se definir $A_p = A_e A_{RS} \Delta z$. Substituindo A_p e $dm_{g,RS}$ na equação (32), obtém-se:

$$\frac{\partial h_g}{\partial z} \Delta z = \frac{1}{\dot{m}_{g,RS}} \left[\dot{q}_R \rho_g \varepsilon_g A_{RS} \Delta z + \alpha(T_c - T_g) A_e A_{RS} \Delta z \right] \quad (34)$$

Considerando a fase gasosa como gás ideal, a equação (34) pode ser escrita como:

$$\dot{m}_{g,RS} c_{pg,RS} \frac{dT_g}{dz} = A_{RS} \left[\dot{q}_R \rho_g \varepsilon_g + \alpha (T_c - T_g) A_e \right], \quad (35)$$

onde A_e (Han e Chung, 2000) é calculada por:

$$A_e = \frac{6\varepsilon_c}{d_p}, \quad (36)$$

que é razão entre a área superficial total de catalisador (considerado esférico) e o volume ocupado. $c_{pg,RS}$ é o calor específico da fase gasosa no *riser*. $\dot{q}_R$ é a potência calorífica, resultante das reações cinéticas de craqueamento ao longo do *riser*. Neste trabalho, adotou-se o modelo de Han e Chung (2000), de quatro pseudo-componentes, para representar o processo. As ligações das moléculas mais pesadas de gasóleo se quebram dando origem a moléculas menores, como a gasolina e o gás combustível, ou então o coque, como ilustrado na Figura 9. A molécula do *lump* gasolina dá origem a moléculas de gás combustível e coque, sendo que a conversão de gás combustível em coque é desprezível em relação às outras reações, não sendo levada em conta no modelo.

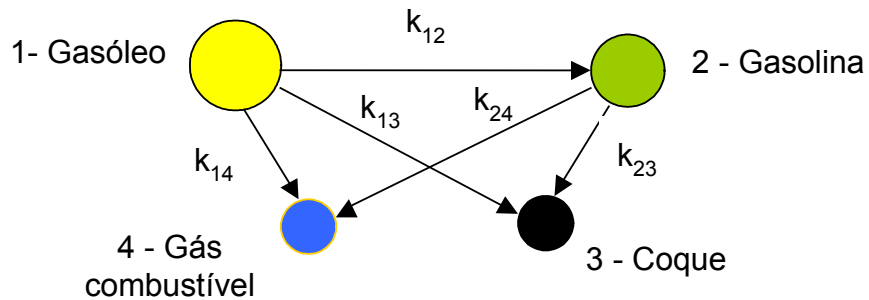


Figura 9 - Desenho esquemático representativo da cinética das reações da fase gasosa.

$$\dot{q}_R = - \left[\Delta H_{12} k_{12} y_{go}^2 + \Delta H_{13} k_{13} y_{go}^2 + \Delta H_{14} k_{14} y_{go}^2 + \Delta H_{23} k_{23} y_{gl} + \Delta H_{24} k_{24} y_{gl} \right] \phi_c \quad (37)$$

onde os termos y_{go} e y_{gl} são, respectivamente, as frações de gasóleo e gasolina da fase gasosa. Os termos ΔH 's da equação (37), se referem às entalpias de reação para transformar um determinado *lump* em outro.

A equação da conservação da energia, aplicada à fase sólida, assume a forma semelhante à da fase gasosa a menos da energia gerada,

$$\dot{m}_c c_{p_c} \frac{dT_c}{dz} = A_{RS} \alpha A_e (T_g - T_c), \quad (38)$$

onde $\dot{m}_c$ é a vazão mássica de catalisador no *riser*.

3.2.3 EQUAÇÃO DA CONSERVAÇÃO DAS ESPÉCIES QUÍMICAS

A composição de cada *lump* é avaliada através da aplicação da equação da conservação das espécies químicas da fase gasosa ao longo do volume de controle infinitesimal da Figura 10.

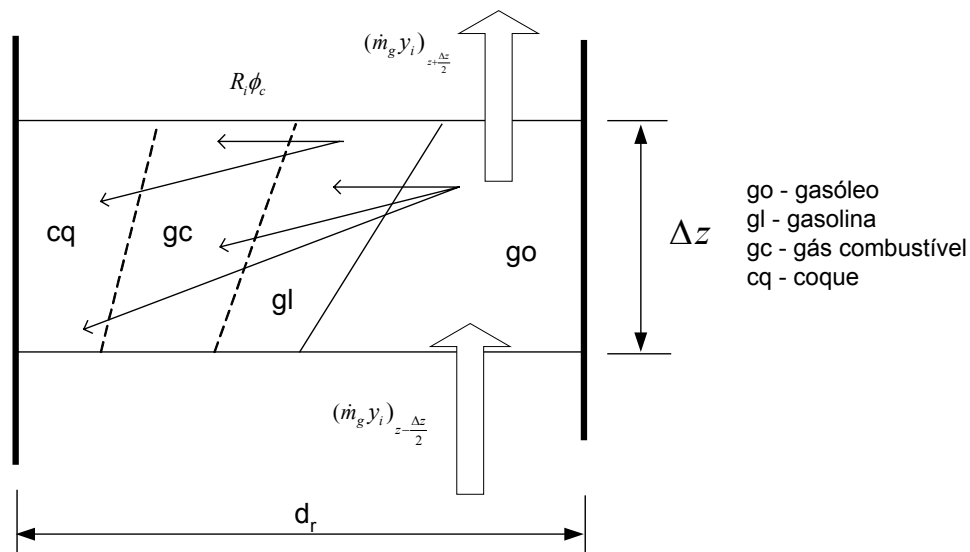


Figura 10 - Volume de controle infinitesimal representativo da conservação das espécies químicas.

A Figura 10 mostra que cada componente é transformado em outro mais leve (com menor massa molecular). Fazendo um balanço de massa sobre o volume infinitesimal, tem-se:

$$\left(\dot{m}_g y_i\right)_{z+\frac{\Delta z}{2}} - \left(\dot{m}_g y_i\right)_{z-\frac{\Delta z}{2}} + m_g R_i \phi_c = 0 \quad (39)$$

onde y_i é a fração mássica do *lump* i da fase gasosa, ϕ_c é a função que representa a desativação do catalisador definida como:

$$\phi_c = e^{\left[-\alpha_c (w_{cq})\right]}. \quad (40)$$

Esta função avalia a redução da atividade do catalisador, onde w_{cq} é a razão entre a massa de coque e a de catalisador. α_c é o coeficiente de desativação, que depende da temperatura da fase gasosa da carga, descrito como:

$$\alpha_c = \alpha_{c0} e^{\left(\frac{E_c}{RT_g}\right)} R_{AN}^{\alpha_c^*} \quad (41)$$

onde E_c é uma energia de ativação, R_{AN} é a proporção entre aromáticos e naftênicos presentes na carga, α_{c0} é um fator pré-exponencial de α_c e α_c^* é uma constante. Os valores destas constantes estão definidos no Anexo A.

O termo $m_g R_i \phi_c$ da equação (39) corresponde à transformação de um componente em outro, sendo R_i , a taxa de formação de cada *lump* por unidade de massa, descrita como

$$R_i = \sum k_{jk} y_i^n. \quad (42)$$

As reações de quebra das ligações das moléculas mais pesadas ocorrem mais rapidamente e portanto são consideradas de segunda ordem. As demais são de primeira ordem. Assim sendo, o expoente “n” da equação (42) pode assumir o valor 2, para as reações de segunda ordem (gasóleo em gasolina, gás combustível e coque) ou 1 para as de primeira ordem (gasolina em gás combustível e coque). k_{jk} são as constantes cinéticas, avaliadas pela equação de Arrhenius:

$$k_{jk} = k_0 e^{\left(\frac{E_{jk}}{RT_g}\right)} \quad (43)$$

onde k_0 é o chamado fator pré-exponencial, $\bar{R}$ é a constante universal dos gases e E_{jk} , a energia de ativação da reação. Os índices j e k correspondem aos valores ilustrados na Figura 10, onde cada componente só pode se transformar em outro que possua cadeias carbônicas mais leves. Estas constantes são definidas para cada reação como:

$$k_{12} = k_{12_0} e^{\left[\frac{-E_{12}}{\bar{R}T_g} \right]}; \quad (44)$$

$$k_{13} = k_{13_0} e^{\left[\frac{-E_{13}}{\bar{R}T_g} \right]}; \quad (45)$$

$$k_{14} = k_{14_0} e^{\left[\frac{-E_{14}}{\bar{R}T_g} \right]}; \quad (46)$$

$$k_{23} = k_{23_0} e^{\left[\frac{-E_{23}}{\bar{R}T_g} \right]}; \quad (47)$$

$$k_{24} = k_{24_0} e^{\left[\frac{-E_{24}}{\bar{R}T_g} \right]}; \quad (48)$$

A taxa de formação transformação do *lump* gasóleo nos outros *lumps* é avaliada da seguinte forma:

$$R_{go} = -[k_{12} + k_{13} + k_{14}] y_{go}^2; \quad (49)$$

Para o caso da gasolina,

$$R_{gl} = k_{12} y_{go}^2 - [k_{23} + k_{24}] y_{gl}; \quad (50)$$

onde a primeira parcela corresponde à quantidade formada a partir do gasóleo, portanto, positiva e de segunda ordem e as outras duas, as quantidades de gasolina transformadas nos outros dois *lumps*, gás combustível e coque. A taxa de formação de gás combustível é avaliada considerando quantidades formadas a partir do gasóleo, de segunda ordem, e da gasolina, de primeira ordem, descritas como

$$R_{gc} = k_{14} y_{go}^2 + k_{24} y_{gl}; \quad (51)$$

A parcela de transformação deste *lump* em coque é muito pequena e portanto, foi desprezada nesta equação (Han e Chung, 2000). Finalmente, o *lump* coque pode

ser formado a partir do gasóleo e da gasolina, envolvendo reações de segunda e primeira ordem respectivamente. A taxa de reação do coque é representada por:

$$R_{cq} = k_{13}y_{go}^2 + k_{23}y_{gl} , \quad (52)$$

Expandindo os dois primeiros termos da equação (39) em uma série de Taylor,

$$(\dot{m}_g y_i)_{z+\frac{\Delta z}{2}} = \dot{m}_g y_i + \frac{\partial(\dot{m}_g y_i)}{\partial z} \frac{\Delta z}{2} . \quad (53)$$

$$(\dot{m}_g y_i)_{z-\frac{\Delta z}{2}} = \dot{m}_g y_i - \frac{\partial(\dot{m}_g y_i)}{\partial z} \frac{\Delta z}{2} \quad (54)$$

e substituindo na própria equação (39), chega-se à equação diferencial representativa da composição do gasóleo vaporizado ao longo do *riser*:

$$\dot{m}_g \frac{dy_i}{dz} = \rho_g \varepsilon_g A_{RS} R_i \phi_c . \quad (55)$$

Lembrando que $\dot{m}_g = \rho_g \varepsilon_g A_{RS} \Delta z$. Note que o diferencial parcial foi substituído pelo total em função de não existir variação de massa de gás no volume.

3.2.4 EQUAÇÃO DA CONSERVAÇÃO DA MASSA

A equação da conservação da massa é evocada no modelo para que se possa avaliar a fração de sólidos ao longo do *riser*:

$$\varepsilon_c = \frac{\dot{m}_c}{\rho_c v_c A_{RS}} , \quad (56)$$

e a fração de vazios é obtida do complemento de ε_c :

$$\varepsilon_g = 1 - \varepsilon_c . \quad (57)$$

3.2.5 EQUAÇÃO DE ESTADO

Para o fechamento do conjunto de equações, utiliza-se a equação dos gases ideais,

$$\rho_g = \frac{PM_{w,g}}{RT_g} , \quad (58)$$

onde $M_{w,g}$ é massa molecular média da fase gasosa, dada por

$$M_{w,g} = \frac{1}{\sum \frac{y_i}{M_{w,i}}} . \quad (59)$$

$M_{w,i}$ é a massa molecular do componente i da fase gasosa.

3.3 REATOR

Para o reator, é utilizado o modelo dinâmico estudado por Melo (2003), cuja representação esquemática encontra-se ilustrada na Figura 11. As seguintes considerações foram feitas para o modelo:

- ✓ Tanto o vaso separador como o *stripper* são tanques de mistura perfeita, ou seja, não há variação das propriedades termodinâmicas das fases gasosa e

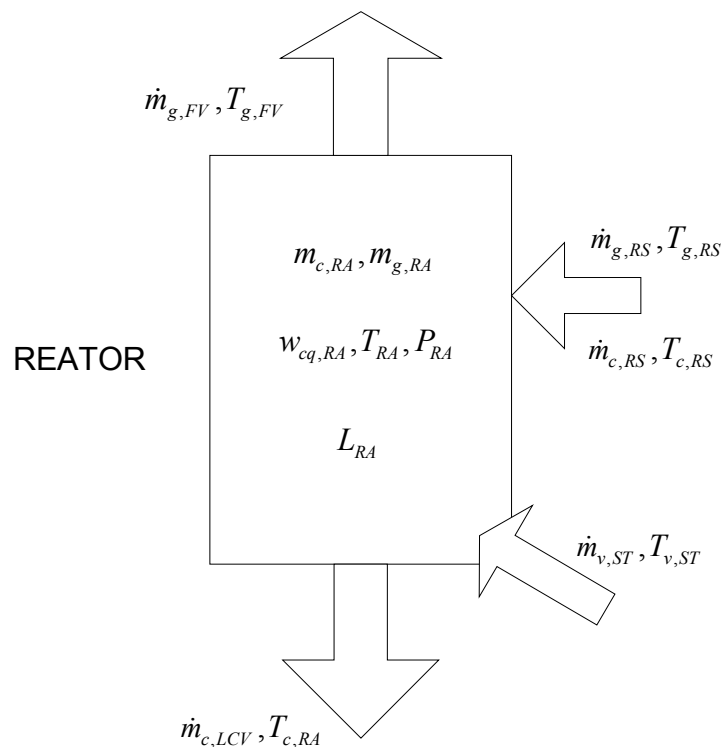


Figura 11 - Desenho esquemático do modelo do reator.

sólida no interior dos volumes e o meio é considerado contínuo;

- ✓ O reator é adiabático, tem o formato cilíndrico, seção transversal variável e está montado numa única estrutura;
- ✓ Existem trocas de calor entre o catalisador, o coque e o vapor d'água;
- ✓ A energia correspondente aos gases vindos do *riser* não é levada em consideração, já que estes gases passam pelo interior dos ciclones e seguem direto para a fracionadora, contribuindo somente para a avaliação da pressão no reator;
- ✓ Há hidrocarbonetos remanescentes do craqueamento e ausência de reações de craqueamento no interior do reator;
- ✓ Não há arraste de catalisador para a corrente de gases e a pressão à jusante da válvula de produtos é uniforme;

Para a construção do modelo, são utilizadas as equações da conservação da massa e da energia, citadas a seguir.

3.3.1 EQUAÇÃO DA CONSERVAÇÃO DA MASSA

O acúmulo de massa de gases no reator, é representado por

$$\frac{dm_{g,RA}}{dt} = \dot{m}_{g,RS} + \dot{m}_{v,ST} - \dot{m}_{g,FV} \quad (60)$$

onde $\dot{m}_{g,RS}$ é a vazão de gases vinda do *riser*, $\dot{m}_{v,ST}$ é a vazão de vapor d'água de lavagem do *stripper* e $\dot{m}_{g,FV}$ é a vazão de gases através da válvula FV, composta de produtos e hidrocarbonetos remanescentes extraídos pelo vapor d'água. $m_{g,RA}$ é a massa de gases contida no reator. No caso do catalisador, o acúmulo de massa é representado por:

$$\frac{dm_{c,RA}}{dt} = \dot{m}_{c,RS} - \dot{m}_{c,LCV} \quad (61)$$

onde $\dot{m}_{c,RS}$ e $\dot{m}_{c,LCV}$ são as vazões de catalisador do *riser* e através da válvula de controle de nível (LCV – *Level Control Valve*). $m_{c,RA}$ é a massa de catalisador no

reator. O nível de catalisador no reator, L_{RA} , é avaliado a partir da definição de massa específica:

$$L_{RA} = \frac{m_{c,RA}}{A_{ST}(1 - \varepsilon_{ST})\rho_c}, \quad (62)$$

onde A_{ST} é a área da seção transversal do *stripper* e ε_{ST} é a fração de vazios no leito do reator ou no *stripper*, avaliada através das correlações de Broadhurst e Becker (1975), citadas em Santos (2000),

$$\varepsilon_{ST} = 0,586\phi^{-0,72} \left[\frac{\mu_{g,RA}^2}{\rho_{g,RA}g(\rho_c - \rho_{g,RA})d_p^3} \right]^{0,029} \left(\frac{\rho_{g,RA}}{\rho_c} \right)^{0,021}, \quad (63)$$

onde $\rho_{g,RA}$ é a massa específica dos gases no reator e $\mu_{g,RA}$, a viscosidade dos gases no reator. Fazendo um balanço de massa de coque no reator e substituindo a equação (61) neste balanço, tem-se

$$m_{c,RA} \frac{dw_{cq,RA}}{dt} = \dot{m}_{c,RS} (w_{cq,RS} - w_{cq,RA} + \nu), \quad (64)$$

onde $w_{cq,RS}$ e $w_{cq,RA}$ são, respectivamente, os teores de coque vindo do *riser* e no reator. ν é o teor de coque formado pelos hidrocarbonetos remanescentes do processo de craqueamento, não retificados pelo *stripper*. Estes hidrocarbonetos ficam aderidos ao catalisador mesmo depois de passar pelos ciclones e, se não forem separados, irão queimar no regenerador. Seu valor é determinado através da equação empírica (Arbel et al., 1995):

$$\nu = 0,0002 + 0,0018 \cdot (1 - k_{ST} \dot{m}_{v,ST}). \quad (65)$$

Esta equação é o resultado de um ajuste feito sobre dados obtidos experimentalmente, onde $k_{ST} = 0,08$ é uma constante que representa a geometria do *stripper*, obtida experimentalmente.

A massa de coque no reator pode ser encontrada combinando a massa de catalisador com o teor de coque no reator:

$$m_{cq,RA} = m_{c,RA} w_{cq,RA} \quad (66)$$

3.3.2 EQUAÇÃO DA CONSERVAÇÃO DA ENERGIA

Um balanço de energia envolvendo os fluxos de catalisador, coque, gases e vapor, resulta na seguinte equação:

$$\frac{dH_{RA}}{dt} = \frac{dH_{c,RA}}{dt} + \frac{dH_{cq,RA}}{dt} + \frac{dH_{v,RA}}{dt} \quad (67)$$

onde a variação de entalpia do reator H_{RA} depende das variações das entalpias do catalisador, $H_{c,RA}$, do coque, $H_{cq,RA}$ e do vapor d'água, $H_{v,RA}$. A equação (67) escrita em termos das entalpias específicas fica

$$\frac{dH_{RA}}{dt} = \frac{d(m_{c,RA}h_{c,RA})}{dt} + \frac{d(m_{cq,RA}h_{cq,RA})}{dt} + \frac{d(m_{v,RA}h_{v,RA})}{dt} \quad (68)$$

onde $m_{c,RA}$, $m_{cq,RA}$ e $m_{v,RA}$ e $h_{c,RA}$, $h_{cq,RA}$ e $h_{v,RA}$ são as massas e entalpias específicas de catalisador, coque e vapor d'água no reator respectivamente. O lado esquerdo da equação é resultado dos fluxos de energia através das fronteiras do reator, e pode ser escrito por

$$\begin{aligned} \frac{dH_{RA}}{dt} = & \dot{m}_{c,RS}h_{c,RS} + \dot{m}_{cq,RS}h_{cq,RS} + \dot{m}_{v,ST}h_{v,ST} - \dot{m}_{v,FV}h_{v,FV} \\ & - \dot{m}_{c,LCV}h_{c,LCV} - \dot{m}_{cq,LCV}h_{cq,LCV} \end{aligned} \quad (69)$$

onde $\dot{m}_{cq,RS}$, $\dot{m}_{cq,LCV}$ e $\dot{m}_{v,FV}$ e $h_{cq,RS}$, $h_{cq,LCV}$ e $h_{v,FV}$ são as vazões e entalpias de coque vindas do *riser*, através da LCV e de vapor que sai do reator respectivamente.

Aplicando a regra da cadeia à equação (68), igualando com a equação (69), combinando com a equação (61), sabendo-se que

$$\frac{dm_{v,RA}}{dt} = \dot{m}_{v,ST} - \dot{m}_{v,FV} \quad (70)$$

que,

$$\frac{dm_{cq,RA}}{dt} = \dot{m}_{cq,RS} - \dot{m}_{cq,LCV}, \quad (71)$$

e considerando aproximação para gases perfeitos, após uma breve manipulação algébrica, chega-se à

$$\frac{dT_{RA}}{dt} = \frac{\dot{m}_{c,RS}(h_{c,RS} - h_{c,RA}) + \dot{m}_v(h_{v,ST} - h_{v,RA}) + \dot{m}_{cq}(h_{cq,RS} - h_{cq,RA})}{m_{c,RA}c_{p_c} + m_{v,RA}c_{p_{v,RA}} + m_{cq,RA}c_{p_{cq}}} \quad (72)$$

onde T_{RA} é a temperatura no interior do reator, c_{p_c} , $c_{p_{v,RA}}$ e $c_{p_{cq}}$ são, respectivamente os calores específicos do catalisador, do vapor no reator e do coque admitidos constantes. $h_{c,RA}$ é a entalpia do catalisador na saída do reator. $h_{v,ST}$ é a entalpia do vapor d'água que entra no *stripper* e $h_{v,RA}$, a entalpia do vapor d'água presente no reator.

Para a determinação da pressão no reator, consideram-se os gases como sendo ideais. Da equação da conservação da massa de gases (60) pode-se escrever que,

$$\frac{d(\rho_{g,RA}V_{g,RA})}{dt} = \dot{m}_{g,RS} + \dot{m}_{v,ST} - \dot{m}_{g,FV} \quad (73)$$

Aplicando a regra da cadeia no lado esquerdo da equação tem-se,

$$\frac{d\rho_{g,RA}}{dt}V_{g,RA} + \frac{dV_{g,RA}}{dt}\rho_{g,RA} = \dot{m}_{g,RS} + \dot{m}_{v,ST} - \dot{m}_{g,FV} \quad (74)$$

Aplicando a regra da cadeia ao primeiro termo do lado esquerdo da equação (74), admitindo que a massa específica é uma função da temperatura e da pressão, tem-se,

$$\frac{\partial \rho_{g,RA}}{\partial t} = \left(\frac{\partial \rho_{g,RA}}{\partial P_{g,RA}} \right)_{T_{g,RA}} \frac{dP_{g,RA}}{dt} + \left(\frac{\partial \rho_{g,RA}}{\partial T_{g,RA}} \right)_{P_{g,RA}} \frac{dT_{g,RA}}{dt} \quad (75)$$

Diferenciando a equação dos gases ideais em relação à pressão e à temperatura e substituindo na equação (75), obtém-se, desenvolvendo os diferenciais de massa específica,

$$\frac{\partial \rho_{g,RA}}{\partial t} = \left(\frac{1}{RT_{g,RA}} \right)_{T_{g,RA}} \frac{dP_{g,RA}}{dt} - \left(\frac{P_{g,RA}}{RT_{g,RA}^2} \right)_{P_{g,RA}} \frac{dT_{g,RA}}{dt} \quad (76)$$

Substituindo agora a equação (76) na equação (74) e rearranjando, chega-se à:

$$\frac{dP_{g,RA}}{dt} = \frac{\bar{R}T_{RA}}{M_{Wg,RA}} \left[\frac{(\dot{m}_{g,RS} + \dot{m}_{v,ST} - \dot{m}_{g,FV}) + \frac{\rho_{g,RA}}{\rho_c} (\dot{m}_{c,RS} - \dot{m}_{c,LCV})}{\left(V_{RA} - \frac{m_{c,RA}}{\rho_c}\right)} \right] + \frac{P_{g,RA}}{T_{RA}} \frac{dT_{RA}}{dt}, \quad (77)$$

onde $P_{g,RA}$ é a pressão no reator e V_{RA} é o volume do reator.

A pressão na base do *stripper*, $P_{b,RA}$, pode ser obtida pela adição do peso de catalisador fluidizado à pressão dos gases no reator:

$$P_{b,RA} = P_{g,RA} + \rho_c g (1 - \varepsilon) L_{RA}. \quad (78)$$

3.4 REGENERADOR

Para o regenerador, cujo esquema encontra-se ilustrado na Figura 12, foi adotado um dos modelos explorados por Penteado (2003), denominado de leito borbulhante. Este modelo admite somente a existência da região densa dividida em duas fases: emulsão e bolha, modeladas como CSTR's. A fase emulsão considera catalisador e gases na condição de mínima fluidização, onde ocorrem as reações de combustão. A fase bolha, isenta de catalisador, é composta inicialmente de ar, cuja finalidade é suprir oxigênio às reações exotérmicas da fase emulsão.

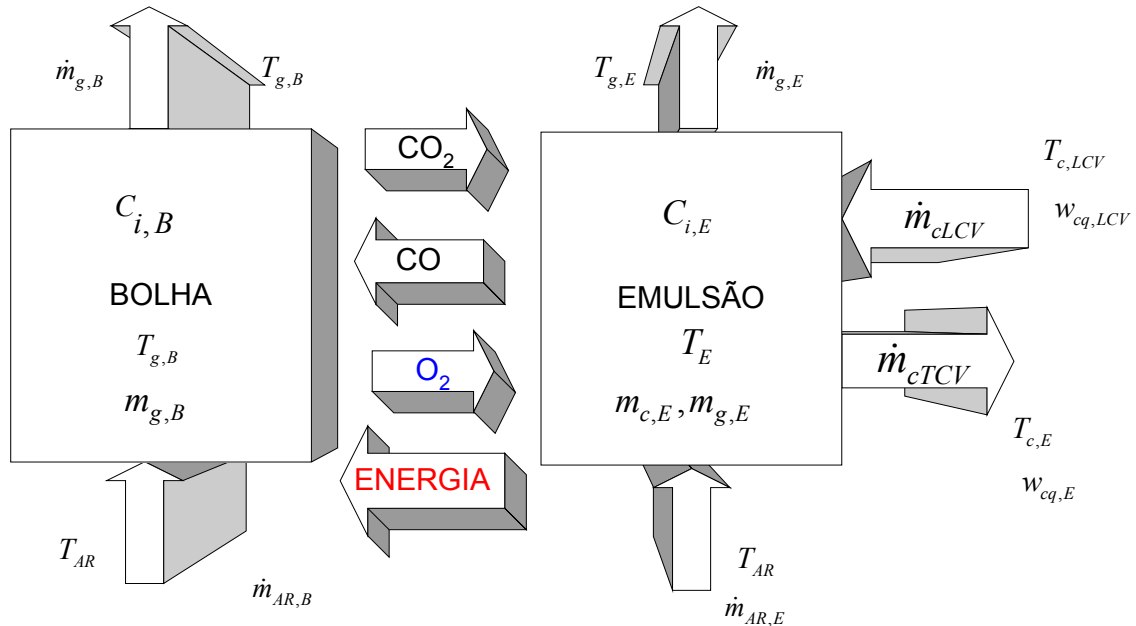


Figura 12 - Esquema do modelo de Leito Borbulhante

As vazões de catalisador gasto proveniente da LCV, $\dot{m}_{c,LCV}$ e regenerado com destino à TCV, $\dot{m}_{c,TCV}$ cruzam as fronteiras do leito fluidizado. Um soprador fornece a vazão de ar de alimentação ($\dot{m}_{AR,B} + \dot{m}_{AR,E}$), e os gases de combustão, oriundos da fase bolha ($\dot{m}_{g,B}$) e emulsão ($\dot{m}_{g,E}$), são retirados pela parte superior do regenerador. Além disso, são feitas as seguintes considerações:

- ✓ A combustão do coque acontece somente na fase emulsão;
- ✓ Pode ocorrer a oxidação de CO em CO₂ na fase bolha;
- ✓ O gás efluente do regenerador é composto por CO, CO₂, O₂, H₂O e N₂;
- ✓ Os teores de hidrogênio e de carbono são constantes no coque;
- ✓ O calor específico do catalisador é suposto constante para a faixa de temperatura de trabalho e o calor específico dos gases é função da temperatura;
- ✓ Há troca de energia e de massa entre as fases e, sólidos e gases estão em equilíbrio na fase emulsão;
- ✓ Não há catalisador na fase bolha.

3.4.1 FASE EMULSÃO

A fase emulsão é onde acontecem efetivamente as reações de combustão e é composta de gases na condição de mínima fluidização. A seguir são apresentadas as equações representativas do modelo.

3.4.1.1 Conservação da massa de sólidos:

O acúmulo de massa de sólidos na fase emulsão, $m_{c,E}$, é avaliado através dos fluxos de catalisador gasto, $\dot{m}_{c,LCV}$, e de catalisador regenerado, $\dot{m}_{c,TCV}$, que atravessam a fronteira da região densa:

$$\frac{dm_{c,E}}{dt} = \dot{m}_{c,LCV} - \dot{m}_{c,TCV} \quad (79)$$

3.4.1.2 Conservação da massa de coque:

Um balanço de massa de coque na fase emulsão do regenerador resulta na seguinte equação:

$$m_{c,E} \frac{d(w_{cq,E})}{dt} = (w_{cq,LCV} - w_{cq,E}) \dot{m}_{c,LCV} - r_{cq,E}''' M_{cq} V_E, \quad (80)$$

onde $w_{cq,E}$ é o teor de coque na fase emulsão e $w_{cq,LCV}$ é o teor de coque no catalisador gasto. $r_{cq,E}'''$ é a taxa de consumo de coque por unidade de volume na fase emulsão, M_{cq} é a massa molecular do coque e V_E , o volume da fase emulsão.

3.4.1.3 Conservação da massa de gases:

Escrevendo a equação da conservação das espécies químicas para cada um dos gases presentes na fase emulsão, tem-se a seguinte equação diferencial:

$$\frac{dC_{i,E}}{dt} = [C_{i,AR} - C_{i,E}] \frac{v_{g,E}}{L_{RG}} + \frac{D_{BE} \delta}{\varepsilon_{mf} (1 - \delta)} (C_{i,B} - C_{i,E}) + \frac{r_{i,E}'''}{\varepsilon_{mf}}, \quad (81)$$

onde o índice i representa os componentes O_2 , CO , CO_2 , H_2O e N_2 . $C_{i,AR}$, $C_{i,B}$ e $C_{i,E}$ são as concentrações de i no ar de alimentação, nas fases bolha e emulsão. Como condições iniciais, as concentrações $C_{i,E}$ podem ser determinadas por:

$$C_{i,E} = \frac{y_{i,E} m_{g,RG}}{M_{wg,RG} \left[V_{RG} - \frac{m_{c,RG}}{\rho_c} \right]} \quad (82)$$

onde $M_{wg,RG}$, $m_{c,RG}$ e V_{RG} são a massa molecular média dos gases, a massa de catalisador e o volume do regenerador, respectivamente. $y_{i,E}$ é a fração mássica de cada gás na fase emulsão. δ é a fração de bolhas no leito fluidizado:

$$\delta = \frac{v_0 - v_{mf}}{v_{g,B}}, \quad (83)$$

onde v_{mf} é a velocidade de mínima fluidização²,

² Velocidade ascendente mínima da fase gasosa que se sobrepõe ao peso de um leito sólido, garantindo a sua expansão.

$$v_{mf} = \frac{Re_{mf} \mu_{g,E}}{d_p \rho_c} . \quad (84)$$

sendo $\mu_{g,E}$ a viscosidade do gás na fase emulsão. $v_{g,B}$ é a velocidade do gás na fase bolha, definida pela correlação de Kunii e Levenspiel (1996), citado em Santos (2000), como

$$v_{g,B} = v_0 - v_{mf} + 0,711\sqrt{gd_B} , \quad (85)$$

onde d_B é o diâmetro da bolha dado em [m] e calculado pelo modelo de Errazu (1979), citado em Santos (2000), pela equação empírica

$$d_B = 0,667 \left(\frac{\dot{V}_{AR}}{\rho_{AR}^2 n} \right)^{0,375} \quad (86)$$

sendo “n” o número de orifícios do distribuidor de ar, $\dot{V}_{AR}$ a vazão dada em m³/s e ρ_{AR} a massa específica do ar dada em kg/m³. Re_{mf} é o Reynolds de mínima fluidização dado pela equação de Ergun (Kunii e Levenspiel (1996)),

$$\frac{1,75 Re_{mf}^2}{\varepsilon_{mf}^3} + \frac{150(1 - \varepsilon_{mf}) Re_{mf}}{\varepsilon_{mf}^3} - \frac{\rho_g g (\rho_c - \rho_{g,E}) d_p^3}{\mu_{g,E}^2} = 0 . \quad (87)$$

onde $\rho_{g,E}$ é a massa específica do gás na fase emulsão. Para a fração de vazios de mínima fluidização é utilizada uma correlação de Broadhurst e Becker (1975), citada em Santos (2000)

$$\varepsilon_{mf} = 0,586 \varphi^{-0,72} \left(\frac{\mu_{g,E}^2}{\rho_g g (\rho_c - \rho_{g,E}) d_p^3} \right)^{0,029} \left(\frac{\rho_{g,E}}{\rho_c} \right)^{0,021} . \quad (88)$$

Ainda na equação (83), v_0 é a velocidade de injeção de ar,

$$v_0 = \frac{\dot{m}_{AR}}{\rho_{AR} A_{RG}} \quad (89)$$

sendo A_{RG} a área transversal do regenerador. D_{BE} na equação (81) é o coeficiente de transferência de massa de gás entre a fase bolha e a emulsão. $r_{i,E}'''$ é a taxa de geração do componente “i” por unidade de volume da fase emulsão. A velocidade do gás na fase emulsão é definida por

$$v_{g,E} = \frac{v_{mf}}{\varepsilon_{mf}(1-\delta)} \quad (90)$$

3.4.1.4 Conservação da energia:

O balanço de energia para a fase emulsão, que considera o equilíbrio térmico entre o gás e o sólido presente na fase, contempla as seguintes parcelas:

- ✓ Energia transportada pelo catalisador gasto;
- ✓ Energia transportada pelo catalisador regenerado;
- ✓ Energia transportada pelo ar insuflado no regenerador e pelos gases de combustão que saem pelo topo;
- ✓ Energia das reações de combustão;
- ✓ Transporte de massa com a fase bolha;
- ✓ Perda de energia pelas paredes do regenerador;
- ✓ Convecção de calor com a fase bolha;

Escrevendo então o balanço de energia, tem-se:

$$\begin{aligned} \left(m_{c,E} c_{p_c} + m_{g,E} c_{p_{g,E}} \right) \frac{dT_E}{dt} = & \dot{m}_{c,LCV} c_{p_c} (T_{c,LCV} - T_E) + \dot{m}_{c,TCV} c_{p_c} (T_{c,TCV} - T_E) + \\ & + \dot{m}_{AR-E} \left[c_{p_{AR}} T_{AR} - c_{p_{g,E}} T_E \right] + \sum \Delta H_r r_{i,E}''' V_E M_{i,E} + D_{BE} V_B M_{O_2} (C_{O_2,B} - C_{O_2,E}) \Delta H_{O_2} + \\ & + \dot{Q}_{loss} - \dot{Q}_{BE} \end{aligned} \quad (91)$$

onde T_E é a temperatura da fase emulsão. $m_{g,E}$ e $m_{c,E}$ são as massas de gases e catalisador na fase emulsão, dadas por,

$$m_{g,E} = \rho_{g,E} \varepsilon_{mf} V_E \quad (92)$$

e

$$m_{c,E} = \rho_c V_E (1 - \varepsilon_{mf}) \quad (93)$$

respectivamente.

$$\rho_{g,E} = \sum C_{i,E} M_i \quad (94)$$

e

$$\rho_{g,B} = \sum C_{i,B} M_i \quad (95)$$

são as massas específicas dos gases em cada fase. $\dot{m}_{AR,E}$ é a vazão mássica de ar de alimentação na fase emulsão, dada por,

$$\dot{m}_{AR,E} = \varepsilon_{mf} (1 - \delta) v_{g,E} \rho_{AR} A_{RG} . \quad (96)$$

$T_{c,LCV}$ e T_{AR} são as temperaturas do catalisador gasto e do ar, respectivamente. $c_{p,g,E}$ e $c_{p,AR}$ são os calores específicos dos gases na fase emulsão e do ar, respectivamente. $\Delta H_{O_2,E}$ é a diferença de entalpia do oxigênio entre as fases emulsão e bolha. ΔH_r é a entalpia de reação, sendo definida como a diferença entre a entalpia dos produtos e a entalpia dos reagentes. $\dot{Q}_{loss}$ constitui a taxa de calor trocada com as vizinhanças e $\dot{Q}_{BE}$, a energia trocada entre as fases bolha e emulsão. V_B e V_E são os volume e $C_{O_2,B}$ e $C_{O_2,E}$ as concentrações de oxigênio nas fases bolha e emulsão, respectivamente.

3.4.2 FASE BOLHA

A fase bolha é formada pelos gases que excedem a condição mínima de fluidização. Em outras palavras, um bolsão de gases que não participa diretamente da combustão, mas que consiste num reservatório que fornece oxigênio para a fase emulsão.

3.4.2.1 Conservação da massa:

A conservação das espécies químicas para cada elemento i da fase bolha, tem a seguinte forma:

$$\frac{dC_{i,B}}{dt} = [C_{i,AR} - C_{i,B}] \frac{v_{g,B}}{L_{RG}} - D_{BE} (C_{i,B} - C_{i,E}) + r_{i,B}''' \quad (97)$$

onde $C_{i,AR}$ é a concentração do gás i no ar, dada por,

$$C_{i,AR} = y_{i,AR} \frac{\rho_{AR}}{M_{w,g,RG}}, \quad (98)$$

onde $r_{i,B}'''$ é a taxa de geração do componente “i” (O_2 , CO , CO_2 , H_2O e N_2) por unidade de volume da fase bolha. L_{RG} é o nível da região densa definido por

$$L_{RG} = \frac{m_{c,E}}{\rho_c \varepsilon_{mf} (1 - \delta) A_{RG}}. \quad (99)$$

Como condições iniciais, as concentrações $C_{i,B}$ podem ser determinadas por,

$$C_{i,B} = \frac{y_{i,B} m_{g, RG}}{M_{w,g, RG} \left[V_{RG} - \frac{m_{c, RG}}{\rho_c} \right]}, \quad (100)$$

onde $y_{i,B}$ é a fração mássica de cada gás na fase bolha.

3.4.2.2 Conservação da energia:

As trocas de energia com a fase emulsão, que definem a temperatura da fase bolha, são representadas por:

- ✓ Energia das reações de combustão;
- ✓ Energia transportada pelo ar insuflado no regenerador e pelos gases de combustão que saem deste para o exterior;
- ✓ Transporte de massa com a fase emulsão;
- ✓ Convecção de calor com a fase bolha;

Todos estes termos estão contemplados no balanço de energia:

$$m_{g,B} c_{p_{g,B}} \frac{dT_B}{dt} = \sum \Delta H_i r_{i,B}''' M_i V_B + \dot{m}_{AR,B} (c_{p_{AR}} T_{AR} - c_{p_{g,B}} T_B) - D_{BE} V_B M_i (C_{i,B} - C_{i,E}) \Delta H_i + \dot{Q}_{BE} \quad (101)$$

O primeiro termo à direita corresponde ao calor gerado pelas reações de oxidação. M_i é a massa molecular do componente “i” na fase bolha. T_B é a temperatura da fase bolha. $\dot{m}_{AR,B}$ é a vazão de ar de alimentação do regenerador para a fase bolha, dada por

$$\dot{m}_{AR,B} = \delta v_{g,B} \rho_{AR} A_{RG}. \quad (102)$$

O segundo termo representa o calor transferido pelo ar de insuflamento e pelos gases de combustão, onde $c_{p_{g,B}}$ é o calor específico dos gases na fase bolha. O segundo termo corresponde às trocas de energia devido às trocas de massa entre as duas fases, onde ΔH_i é a diferença de entalpia do gás i entre as fases emulsão e bolha. O quarto termo representa a troca de calor por convecção com a fase emulsão.

3.4.2.3 Equação de estado

A equação dos gases perfeitos pode ser escrita na seguinte forma:

$$P_{RG} = \frac{\rho_{g,RG} \bar{R} T_{g,RG}}{M_{wg,RG}}. \quad (103)$$

Esta equação é utilizada para avaliar a pressão no regenerador. A massa específica dos gases é calculada a partir da sua definição, razão entre massa e volume ocupado pelos gases:

$$\rho_{g,RG} = \frac{m_{g,RG}}{\left(V_{RG} - \frac{m_{c,RG}}{\rho_c} \right)} \quad (104)$$

e a massa molecular média dos gases, $M_{wg,RG}$, por

$$M_{wg,RG} = \sum y_{i,D} M_{wi} \quad (105)$$

onde $y_{i,D}$ é a fração do gás i na região densa.

A pressão na base do regenerador é calculada combinando a pressão do regenerador com a coluna de catalisador.

$$P_{b,RG} = P_{RG} + \rho_{g,RG} \epsilon_{mf,RG} g L_{RG} \quad (106)$$

3.5 MODELO DAS VÁLVULAS E LINHAS DE COMUNICAÇÃO

As vazões de catalisador são calculadas através da aplicação da equação de Bernoulli entre os pontos a montante e a jusante das válvulas “j” (LCV e TCV).

$$\dot{m}_{c,j} = K_j \varepsilon_c \sqrt{\frac{c_{1,j} \Delta P_j}{\rho_c \left(\frac{c_2 d_m^4}{A_j^2} - 1 \right)}} \quad (107)$$

onde K_j é a constante de calibração da válvula j , $d_{m,j}$ é o diâmetro à montante da válvula e ε_c a fração de sólidos. A constante $c_{1,j}$ é determinada por

$$c_{1,j} = 2(\rho_c A_{m,j})^2 \quad (108)$$

onde $A_{m,j}$ é a área a montante de cada válvula e

$$c_2 = \frac{\pi^2}{16}. \quad (109)$$

A área de abertura de cada válvula, A_j é definida por

$$A_j = A_{0,j} \sqrt{a_j}, \quad (110)$$

onde $A_{0,j}$ é a área de abertura máxima e a_j o fator de abertura. ΔP_j é o diferencial de pressão na válvula

$$\Delta P_j = P_{m,j} - P_{j,j} \quad (111)$$

As pressões a montante ($P_{m,j}$) e a jusante ($P_{j,j}$) das válvulas são determinadas a partir das pressões nos equipamentos vizinhos e das colunas estáticas existentes entres ambos. No caso da pressão à montante da válvula LCV,

$$P_{m,LCV} = P_{VS} + \gamma_{c,RA} (L_{c,RA} + H_{m,LCV}) \quad (112)$$

onde $H_{m,LCV}$ é a diferença de cotas entre a saída do *stripper* e a entrada da LCV. Para a TCV,

$$P_{m,TCV} = P_{RG} + \gamma_{c,RG} (L_{RG} + H_{m,TCV}) \quad (113)$$

onde $H_{m,TCV}$ é a diferença de cotas entre a saída do regenerador e a entrada da TCV. O peso específico do catalisador fluidizado à montante da TCV é considerado igual ao do leito do regenerador, dado por:

$$\gamma_{c,RG} = \rho_c \varepsilon_{c,RG} g \quad (114)$$

A pressão a jusante da LCV é representada por

$$P_{j,LCV} = P_{b,RG} - \gamma_{c,RA} H_{j,LCV} , \quad (115)$$

onde $P_{b,RG}$ é a pressão na base do regenerador, $H_{j,LCV}$ é a diferença de cotas entre a entrada do regenerador e a saída da LCV. O peso específico do catalisador fluidizado na linha será:

$$\gamma_{c,RA} = \rho_c (1 - \varepsilon_{RA}) g . \quad (116)$$

A fração de vazios à montante da TCV é considerada igual à fração de vazios no regenerador.

Para as válvulas de gás do regenerador (GV) e válvula de produtos (FV) o equacionamento é similar:

$$\dot{m}_{g,j} = K_j \sqrt{\frac{c_{1,j} \Delta P_j}{\rho_{g,j} \left(\frac{c_2 d_{m,j}^4}{A_j^2} - 1 \right)}} \quad (117)$$

onde $\rho_{g,j}$ é a massa específica do gás na válvula j. Os valores de $c_{1,j}$ e A_j são determinados da mesma forma que para as válvulas LCV e TCV através das equações (108) e (110). Para maiores detalhes no desenvolvimento dos modelos do reator e do regenerador, consultar as dissertações de Melo (2003) e Penteado (2003).

3.6 MODELO DE CONTROLE

Como forma de verificação das potencialidades do modelo submetido a ações de controle, implementou-se um controlador do tipo Proporcional Integral (PI). Para ilustrar os componentes principais deste sistema de controle, toma-se como exemplo, o sistema de controle de temperatura na saída do *riser*, ilustrado na Figura 13. O sistema é composto basicamente de um controlador automático, um amplificador de sinal, um atuador e um sensor.

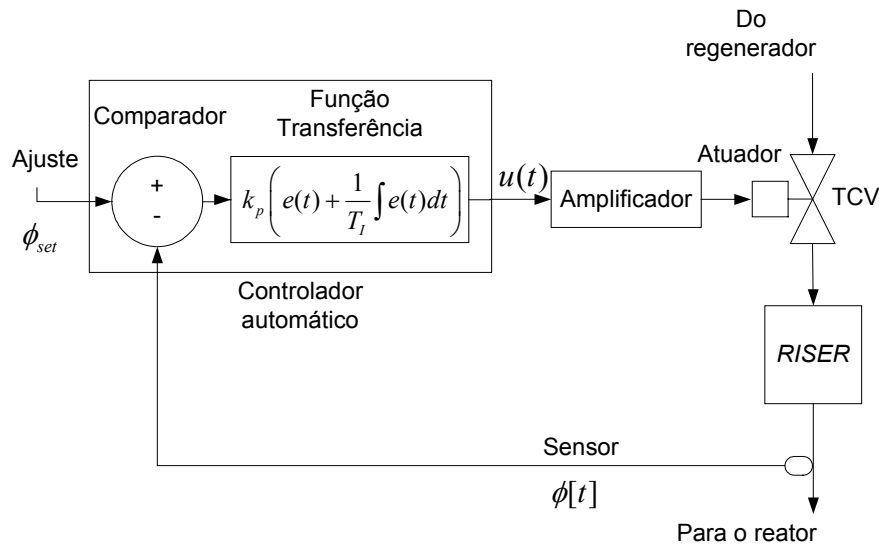


Figura 13 - Sistema de controle de temperatura de catalisador na saída do riser.

A função do sensor é medir a variável controlada (temperatura do catalisador) e a do controlador automático é de comparar o sinal transmitido pelo sensor com um sinal originado do ajuste, gerando um sinal de correção que é amplificado e transmitido para o mecanismo de acionamento da válvula TCV. Com isso, varia-se a vazão de catalisador, provocando alteração no balanço térmico do riser e, com isso, na temperatura da saída.

A função transferência do controlador PI, como o próprio nome já diz, possui parcelas de ação de controle: uma proporcional e outra integral:

$$u(t) = u_p(t) + u_i(t) \quad (118)$$

onde $u_p(t)$ é a parcela proporcional e $u_i(t)$ a integral. A ação de controle proporcional mantém uma relação linear entre a posição final do atuador e o sinal de erro atuante $e(t)$,

$$u_p(t) = K_p e(t), \quad (119)$$

onde K_p é a sensibilidade proporcional ou ganho e $e(t)$ é o erro

$$e(t) = \zeta_{set} - \zeta[t]. \quad (120)$$

ζ_{set} é o ajuste desejado para a variável controlada e $\zeta[t]$ o seu valor no instante t . Este tipo de controlador é essencialmente um amplificador com um ganho ajustável.

A ação integral é uma ação controladora na qual há uma relação linear contínua entre o valor da variável controlada e a taxa de movimento do atuador, representada por

$$\frac{du_I(t)}{dt} = K_I e(t) \quad (121)$$

ou

$$u_I(t) = K_I \int_0^t e(t) dt \quad (122)$$

onde K_I é o ganho integral. Se o valor de $e(t)$ varia, então o valor de $u(t)$ varia duas vezes mais rápido. Para erro atuante nulo, o valor de $u(t)$ permanece inalterado. A equação (122) pode ser escrita ainda como

$$u_I(t) = \frac{K_P}{T_I} \int_0^t e(t) dt \quad (123)$$

onde T_I é chamado de tempo integral, que tem a função de ajustar a ação de controle integral. Combinando (123) e (119) com (118), chega-se à equação de controle PI:

$$u(t) = K_P \left(e(t) + \frac{1}{T_I} \int_0^t e(t) dt \right). \quad (124)$$

Tanto K_P como T_I são ajustáveis. O tempo integral ajusta a ação de controle integral, enquanto uma mudança no valor de K_P afeta tanto a parte proporcional como a parte integral da ação de controle.

O modelo descrito acima é aplicado também às válvulas LCV, GV e FV, onde as variáveis controladas são: o nível de catalisador no *stripper* e as pressões no regenerador e vaso separador respectivamente. Este modelo associa o sinal de controle da equação (124) com a razão de abertura de cada uma das válvulas a_j inserida na equação (110), obrigando que as variáveis do modelo assumam valores pré-estabelecidos.

4 METODOLOGIA DE SOLUÇÃO

A seguir, são descritas as metodologias de solução das equações do modelo do FCC. As soluções são consideradas separadamente para cada componente e em seguida são integradas formando um conjunto simultâneo de equações. As condições de contorno do problema são: temperatura (T_{gol}) e vazão de gásóleo ($\dot{m}_{gol}$), vazões de vapores de *lift* ($\dot{m}_{vl}$) e de dispersão ($\dot{m}_{vd}$), temperaturas de vapor de *lift* (T_{vl}) e de dispersão (T_{vd}) no *riser*, vazão de ar de alimentação no regenerador ($\dot{m}_{AR}$), pressão atmosférica, pressão dos gases na fracionadora (P_F) e pressão dos gases na caldeira de CO (P_{CO}).

4.1 SOLUÇÃO DO MODELO DO RISER

Como descrito no capítulo 3, a modelagem divide o *riser* em duas regiões distintas: uma seção de vaporização, representada por equações algébricas e outra, que compreende o escoamento, descrita por equações diferenciais ordinárias.

4.1.1 SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DA SEÇÃO DE VAPORIZAÇÃO

As equações algébricas da seção de vaporização, são resolvidas admitindo que a pressão na seção (P_{SV}), a vazão ($\dot{m}_{c,TCV}$) e a temperatura ($T_{c,TCV}$) do catalisador são conhecidas e provenientes da solução do modelo da linha de catalisador regenerado.

4.1.2 SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DA SEÇÃO DE ESCOAMENTO

As equações representativas desta seção, citadas no item 3.2, são discretizadas e resolvidas pelo método de Diferenças Finitas. A seguir são apresentados os processos de discretização das equações de conservação, e em seguida o algoritmo de solução.

4.1.2.1 Conservação da quantidade de movimento para as fases

A equação da conservação da quantidade de movimento para a fase “i” é apresentada na forma diferencial pela equação (25) e repetida aqui por conveniência:

$$\frac{d(\rho_i \varepsilon_i v_i^2)}{dz} = -\frac{d(P \varepsilon_i)}{dz} - \rho_i g \varepsilon_i - \frac{4\tau_{pi} \varepsilon_i}{d_r} \pm F_D \varepsilon_c. \quad (25)$$

A Figura 14 ilustra o elemento nodal onde é feita a discretização da equação (25).

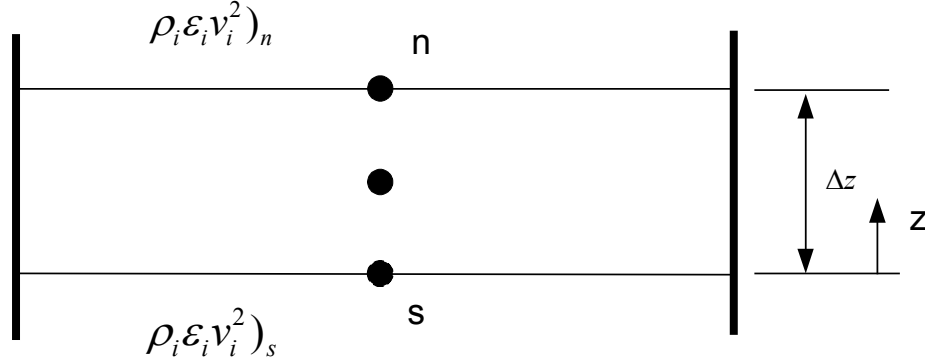


Figura 14 – Desenho esquemático de um elemento nodal.

Aproximando as derivadas por diferenças e considerando uma aproximação implícita para os demais termos, tem-se que

$$\frac{(\rho_i \varepsilon_i v_i^2)_n - (\rho_i \varepsilon_i v_i^2)_s}{\Delta z} = \frac{-(P \varepsilon_i)_n + (P \varepsilon_i)_s}{\Delta z} - (\rho_i g \varepsilon_i)_n - \frac{4(\tau_{pi} \varepsilon_i)_n}{d_r} \pm (F_D \varepsilon_c)_n. \quad (125)$$

onde τ_{pi} é a tensão de cisalhamento entre a fase i e a parede e pode ser expressa por:

$$\tau_{pi} = f_{pi} \frac{v_i^2}{2} \quad (126)$$

Remanejando a equação (125), chega-se à:

$$(v_i^2 \rho_i \varepsilon_i)_n \left[1 + \frac{2}{d_r} (f_{pi})_n \Delta z \right] = (\rho_i \varepsilon_i v_i^2)_s - (P \varepsilon_i)_n + (P \varepsilon_i)_s - (\rho_i g \varepsilon_i)_n \Delta z \pm (F_D \varepsilon_c)_n \Delta z. \quad (127)$$

Particularizando para a fase gasosa,

$$(v_g^2 \rho_g \varepsilon_g)_n \left[1 + \frac{2}{d_r} (f_{pg})_n \Delta z \right] = (\rho_g \varepsilon_g v_g^2)_s - (P \varepsilon_g)_n + (P \varepsilon_g)_s - (\rho_g g \varepsilon_g)_n \Delta z - (F_D \varepsilon_c)_n \Delta z. \quad (128)$$

Observe que há termos na equação que apresentam coeficientes negativos, o que pode causar instabilidades na solução iterativa. De forma a eliminá-los, utiliza-se o seguinte artifício: i) aproxima-se o termo v_g^2 como sendo o produto de velocidades em duas iterações subseqüentes ($v_g v_g^*$); ii) multiplica-se e divide-se os termos negativos por valores de velocidade em duas iterações subseqüentes. A equação (128) assume então a forma:

$$(v_g v_g^* \rho_g \varepsilon_g)_n G + \frac{(P \varepsilon_g v_g)_n}{(v_g^*)_n} + \left[(F_D \varepsilon_c)_n + (g \rho_g \varepsilon_g)_n \right] \frac{\Delta z (v_g)_n}{(v_g^*)_n} = (\rho_g \varepsilon_g v_g^2)_s + (P \varepsilon_g)_s \quad (129)$$

Resolvendo, agora para a equação (129) tem-se:

$$(v_g)_n = (v_g^*)_n \frac{(\rho_g \varepsilon_g v_g^2)_s + (P \varepsilon_g)_s}{(\rho_g \varepsilon_g v_g^{*2})_n G + (P \varepsilon_g)_n + \left[(F_D \varepsilon_c)_n + (g \rho_g \varepsilon_g)_n \right] \Delta z} \quad (130)$$

onde o superescrito * representa a variável na iteração anterior e G representa

$$G = \left[1 + \frac{2}{d_r} (f_{pg})_n \Delta z \right] \quad (131)$$

Aplicando o mesmo procedimento, a partir da equação (127), para a fase sólida,

$$(v_c)_n = (v_c^*)_n \frac{(\rho_c \varepsilon_c v_c^2)_s + (P \varepsilon_c)_s + (F_D \varepsilon_c)_n \Delta z}{(\rho_c v_c^{*2})_n S + (P)_n + g \rho_c \Delta z} \quad (132)$$

Note que o processo iterativo cessa quando $(v_g)_n = (v_g^*)_n$ e $(v_c)_n = (v_c^*)_n$. S representa

$$S = \left[1 + \frac{2}{d_r} (f_{pc})_n \Delta z \right] \quad (133)$$

Sabe-se da equação da continuidade em regime estacionário para a fase gasosa, que a vazão de gás no *riser* pode ser escrita como:

$$\dot{m}_g = (\rho_g v_g \varepsilon_g)_n A_{RS}, \quad (134)$$

e para a fase sólida

$$\dot{m}_c = (\rho_c v_c \varepsilon_c)_n A_{RS}. \quad (135)$$

Estas vazões devem ser constantes em cada volume diferencial, já que não há acúmulo de massa. Substituindo as equações (134) e (135) nas equações (130) e (132) respectivamente, tem-se para a fase gasosa:

$$(v_g)_n = (v_g^*)_n \frac{\frac{(\dot{m}_g v_g)_s}{A_{RS}} + (P \varepsilon_g)_s}{\frac{(\dot{m}_g v_g^*)_n}{A_{RS}} G + (P \varepsilon_g)_n + \left[(F_D \varepsilon_c)_n + (g \rho_g \varepsilon_g)_n \right] \Delta z}, \quad (136)$$

e para a fase sólida,

$$(v_c)_n = (v_c^*)_n \frac{\frac{(\dot{m}_c v_c)_s}{A_{RS}} + (P \varepsilon_c)_s + (F_D \varepsilon_c)_n \Delta z}{\left[\rho_c (S v_c^{2*})_n + (P)_n + g \rho_c \right] \Delta z}. \quad (137)$$

As velocidades do catalisador e do gás nos contornos do domínio são, respectivamente, $v_{c,SV}$ e $v_{g,SV}$, que são as velocidades das fases na seção de vaporização do *riser*.

4.1.2.2 Conservação da energia para as fases

Discretizando a equação da conservação da energia para a fase gasosa (equação (35)) e aplicando aproximação implícita, obtém-se:

$$\dot{m}_g c p_g \frac{(T_g)_n - (T_g)_s}{\Delta z} = A_{RS} \left\{ \alpha A_e \left[(T_c)_n - (T_g)_n \right] + (\rho_g \varepsilon_g \dot{q}_R)_n \right\}. \quad (138)$$

Resolvendo a equação (138) para $(T_g)_n$, chega-se à:

$$(T_g)_n = \frac{\frac{(\alpha_c T_c)_n A_e + (\rho_g \varepsilon_g \dot{q}_R)_n}{(c p_g)_n \dot{m}_g} A_{RS} \Delta z + (T_g)_s}{1 + \left(\frac{\alpha}{c p_g} \right)_n A_e \frac{A_{RS}}{\dot{m}_g} \Delta z}. \quad (139)$$

Discretizando a equação da energia aplicada à fase sólida (equação (38)) e aplicando aproximação implícita, tem-se:

$$\dot{m}_c c_{p_c} \frac{(T_c)_n - (T_c)_s}{\Delta z} = A_{RS} [\alpha A_e [(T_c)_n - (T_g)_n]] \quad (140)$$

Resolvendo para $(T_c)_n$, chega-se à:

$$(T_c)_n = \frac{(T_c)_s + (\alpha_c T_g)_n \frac{A_{RS} A_e}{\dot{m}_c c_{p_c}} \Delta z}{1 + \frac{A_{RS}}{\dot{m}_c c_{p_c}} (\alpha_c)_n A_e \Delta z} \quad (141)$$

As temperaturas do catalisador e do gás nos contornos do domínio são, respectivamente, $T_{c,SV}$ e $T_{g,SV}$, que são as temperaturas das fases na seção de vaporização do *riser*.

4.1.2.3 Conservação das espécies químicas

A quantidade de calor gerada pelas reações químicas exige que se conheça a composição da fase gasosa. Para isto, discretiza-se a equação diferencial de conservação das espécies químicas dada pela equação (55),

$$m_g \frac{dy_i}{dz} = \rho_g \varepsilon_g A_{RS} R_i \phi_c \quad (55)$$

Discretizando por diferenças finitas e utilizando formulação implícita:

$$\frac{(y_i)_n - (y_i)_s}{\Delta z} = \left(\rho_g \varepsilon_g \frac{R_i \phi_c}{\dot{m}_g} \right)_n A_{RS} \quad (142)$$

e resolvendo para $(y_i)_n$, tem-se:

$$(y_i)_n = (y_i)_s + A_{RS} \frac{(\rho_g \varepsilon_g R_i \phi_c)_n}{(\dot{m}_g)_n} \Delta z \quad (143)$$

As frações de cada *lump* (y_i) nos contornos do domínio são, respectivamente, $y_{go,SV}$, $y_{gl,SV}$, $y_{gc,SV}$ e $y_{cq,SV}$, que são as frações de cada *lump* na seção de vaporização do *riser*.

$$(y_{go})_s = (y_{go})_{z=0} = y_{go,SV}; \quad (144)$$

$$(y_{gl})_s = (y_{gl})_{z=0} = y_{gl,SV}; \quad (145)$$

$$(y_{gc})_{z=0} = y_{gc,SV}; \quad (146)$$

$$(y_{cq})_{z=0} = y_{cq,SV}. \quad (147)$$

4.1.2.4 Conservação da massa para as fases

A equação da conservação da massa de catalisador é escrita de forma a se determinar a fração de vazios da fase sólida,

$$(\varepsilon_c)_n = \frac{\dot{m}_c}{\rho_c (v_c)_n A_{RS}}, \quad (148)$$

que depende da velocidade do catalisador em cada volume. A massa específica da fase sólida é considerada constante e, para a fase gasosa, a fração de vazios é o complemento da equação (148), ou seja,

$$(\varepsilon_g)_n = 1 - (\varepsilon_c)_n \quad (149)$$

As frações de vazio e de sólido nos contornos do domínio são, respectivamente, $\varepsilon_{c,SV}$ e $\varepsilon_{g,SV}$, avaliadas na seção de vaporização do *riser*. Portanto:

$$(\varepsilon_g)_s = (\varepsilon_g)_{z=0} = \varepsilon_{g,SV} \quad (150)$$

$$(\varepsilon_c)_s = (\varepsilon_c)_{z=0} = \varepsilon_{c,SV} \quad (151)$$

4.1.2.5 Equação dos gases ideais

Em um escoamento compressível, utiliza-se a equação de estado (no caso a lei dos gases perfeitos) para avaliar a pressão, enquanto a equação da conservação da massa é empregada para calcular a massa específica.

No *riser*, a temperatura do escoamento varia significativamente ao longo o seu comprimento. No entanto, a variação da pressão ao longo do *riser* é pequena, mostrando um comportamento similar àquele encontrado em escoamentos

incompressíveis. Sendo assim, a massa específica varia com a temperatura mas muito pouco com a pressão.

Se for adotado o procedimento de cálculo, onde a pressão é avaliada pela equação dos gases perfeitos e a massa específica dos gases pela conservação da massa, nota-se que qualquer oscilação na massa específica durante o processo iterativo provoca grandes variações da pressão, causando instabilidade no processo de solução. A fim de evitar este problema, a equação dos gases perfeitos passa a ser usada para a determinação da massa específica (ρ_g), como uma função da temperatura, da massa molecular e da pressão. Uma vez que não há uma equação explícita para avaliar a pressão ao longo do *riser*, utiliza-se um artifício numérico para corrigir a pressão durante o processo iterativo. O procedimento consiste no seguinte:

Sabe-se que o valor da pressão na face “n” é menor que seu valor na face sul. Assim:

$$(P)_n = (P)_s - \Delta P, \quad (152)$$

onde ΔP é a queda de pressão no volume de controle diferencial. Uma vez que a queda de pressão ao longo do *riser* está próxima à do escoamento incompressível, é razoável supor que:

$$(P)_n^i - (P)_s^i = K(\dot{m}_g)^2, \quad (153)$$

onde K é uma constante qualquer. O superescrito i indica o valor da variável i em uma determinada iteração.

Admite-se agora que, durante o processo iterativo, tem-se valores temporários para as pressões e para a vazão do gás. Sendo assim, para a iteração posterior a i , tem-se:

$$P_n^{i+1} - P_s^i = K(\dot{m}_g^i)^2 \quad (154)$$

Subtraindo a equação (153) da equação (154), tem-se:

$$P_n^{i+1} - P_n^i - (P_s^i - P_s^i) = K[(\dot{m}_g^i)^2 - (\dot{m}_g^i)^2]. \quad (155)$$

Como a pressão P_s é conhecida, a variação da pressão na face “s” é nula de uma iteração para outra,

$$P_n^{i+1} - P_n^i = K \left[(\dot{m}_g^i)^2 - (\dot{m}_g)^2 \right]. \quad (156)$$

Desta forma, pode-se escrever que,

$$P_n^{i+1} = P_n^i + K \left[(\dot{m}_g^i)^2 - (\dot{m}_g)^2 \right]. \quad (157)$$

O índice $i+1$ indica a próxima iteração. $\dot{m}_g^i$ é o valor da vazão do gás avaliado por:

$$\dot{m}_g^i = \rho_g^i v_g^i \varepsilon_g^i A_{RS} \quad (158)$$

Note que, enquanto houver um desbalanço entre a vazão de gás conhecida ($\dot{m}_g$) e a avaliada pela equação (158) a pressão P_n deverá ser corrigida. Observe que quando $\dot{m}_g^i$ for menor do que $\dot{m}_g$, a pressão P_n deverá diminuir e quando $\dot{m}_g^i$ for maior do que $\dot{m}_g$, a pressão deverá aumentar. Isto está de acordo com o efeito que a pressão deve produzir na velocidade calculada pela equação da conservação da quantidade de movimento. Observe ainda que quando $\dot{m}_g^i$ for igual a $\dot{m}_g$, não há mais correção da pressão e tem-se assim a solução do problema. O valor de K deverá ser escolhido convenientemente para garantir a estabilidade e convergência da solução.

Com o valor da pressão obtido através da equação (157), determina-se a massa específica dos gases pela equação dos gases perfeitos,

$$(\rho_g)_n = \frac{(PM_{wg})_n}{(\bar{R}T_g)_n}. \quad (159)$$

Na base do *riser*, a pressão será

$$(P)_s = (P)_{z=0} = P_{SV} \quad (160)$$

ou seja, a pressão no primeiro nó discretizado é igual à pressão na seção de vaporização.

4.1.3 CORREÇÃO DA PRESSÃO NA SEÇÃO DE VAPORIZAÇÃO

Admite-se que a pressão no topo do *riser*, que é igual à pressão no reator, é conhecida. A pressão na seção de vaporização na base do *riser* deverá ser avaliada em função do escoamento e da pressão no topo. Como o processo de solução do escoamento é em marcha, da base para o topo, deve-se admitir um valor para a pressão na base. Neste caso, assume-se um valor de pressão na base maior que a do reator, coerente com a vazão estabelecida como condição inicial. Resolve-se o escoamento no *riser* e por consequência a pressão ponto a ponto. Compara-se então o valor da pressão no último volume com a pressão no topo. A diferença é utilizada para corrigir a pressão na base. Isto é feito porque o gradiente de pressão ao longo do *riser* é aproximadamente linear. Desta forma,

$$P_{SV} = P_{SV} + (P_{RA} - P_{j=m}) \quad (161)$$

onde j é o contador de volumes e “ m ” o último nó.

4.1.4 CRITÉRIO DE CONVERGÊNCIA DO MODELO DO RISER

Para avaliar a convergência em cada nó da malha na região de escoamento do *riser*, é necessário estabelecer um critério de convergência. Neste caso, foram adotados dois critérios: resíduos relativos das equações de conservação da quantidade de movimento das fases gasosa e sólida e, resíduo da equação da conservação da massa da fase gasosa.

Para as equações de conservação da quantidade de movimento o resíduo relativo é definido por

$$e_{qm} = \frac{\frac{d(m_i v_i)_n}{dt} - \sum F_i}{(m_i v_i)_s} \quad (162)$$

onde o numerador corresponde ao resíduo calculado do nó entre o termo de inércia e a soma das forças de campo e superfície que atuam no nó. O denominador corresponde à quantidade de movimento do nó sul. Desta forma, a equação (162) fica:

$$e_{qm} = \frac{\dot{m}_i [(v_i)_n - (v_i)_s] - \left[\frac{-(P\varepsilon_i)_n + (P\varepsilon_i)_s}{\Delta z} - (\rho_i g \varepsilon_i)_n - \frac{4(\tau_{pi} \varepsilon_i)_n}{d_r} \pm (F_D \varepsilon_c)_n \right] A_{RS} \Delta z}{(\dot{m}_i v_i)_s} \quad (163)$$

Para o caso do erro da equação da conservação da massa, a convergência é atingida quando o erro relativo for menor ou igual ao estipulado. O erro relativo é definido pela razão da diferença entre a vazão calculada pela equação (158) e a vazão real, e a vazão real da fase gasosa.

$$e_m = \frac{\dot{m}_g^i - \dot{m}_g}{\dot{m}_g} \quad (164)$$

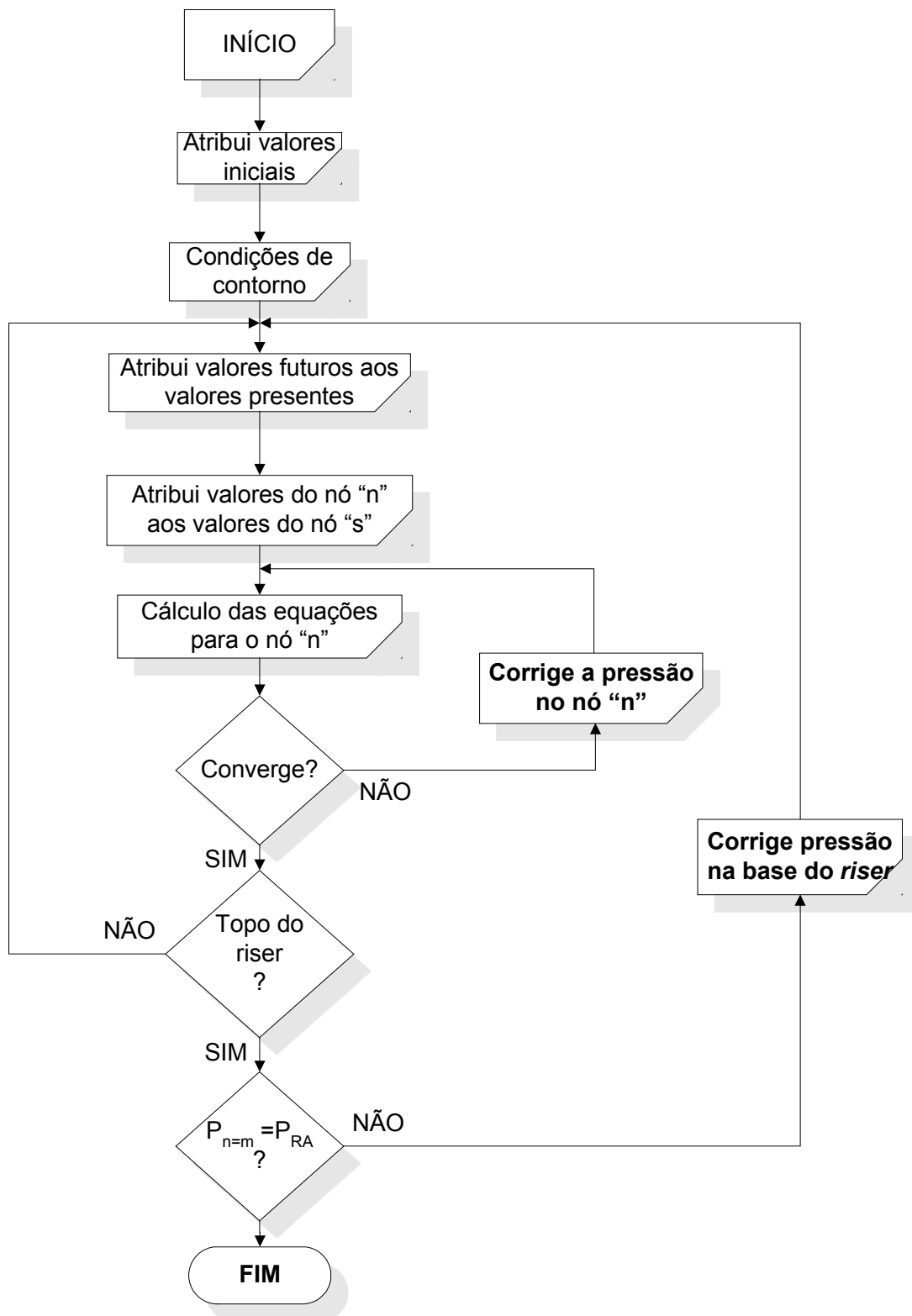
4.2 ALGORITMOS DE SOLUÇÃO

As equações (136), (137), (139), (141), (148), (149), (157) e (159) formam então, um sistema de equações com as incógnitas: $(v_g)_n$, $(v_c)_n$, $(T_c)_n$, $(T_g)_n$, $(P)_n$, $(\varepsilon_c)_n$, $(\varepsilon_g)_n$ e $(\rho_g)_n$. Este sistema, composto de oito equações e oito incógnitas, é resolvido iterativamente para um mesmo nó “n”. A convergência é alcançada através da verificação da equação da conservação da massa e de um balanço de forças aplicado no nó “n”.

4.2.1 ALGORITMO DE SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES NO RISER

A solução das equações do *riser* segue o fluxograma da Figura 15. Inicialmente, serão atribuídos valores iniciais. Em seguida são introduzidas as condições de contorno para o *riser*. Além da vazão e temperatura do gasóleo e do vapor, são consideradas como condições de contorno a pressão a montante da TCV e no reator e a temperatura do catalisador regenerado. Estes valores podem variar constantemente ao longo do tempo. Na seqüência, admite-se que os valores das variáveis no tempo futuro são idênticos aos valores no tempo presente. O próximo passo é igualar os valores das variáveis no nó “i” aos valores no nó “i-1”. Calcula-se então seqüencialmente as equações (141), (143), (139), (136), (132), (148), (149), (158), (157) e (159) para o nó “n” em função dos valores no nó “s”. Testa-se a convergência das equações no nó “n” através dos balanços de massa e quantidade

de movimento. Caso a convergência não tenha sido atingida, corrige-se a pressão no nó “n” e resolve-se novamente as equações. Uma vez que a convergência tenha sido atingida, verifica-se se o topo do *riser* foi alcançado; ou seja, se todos os nós foram resolvidos ao longo do *riser*. Caso isto não seja verdadeiro, procede-se a avaliação das variáveis no próximo nó. Se o topo do *riser* foi alcançado, verifica-se se a pressão calculada no topo é igual à pressão no reator. Se estas pressões não forem idênticas, corrige-se a pressão na base do *riser* e novamente as equações são resolvidas desde a base do *riser*. Caso a pressão no topo tenha alcançado a convergência, evolui-se para o próximo instante de tempo.

Figura 15 – Algoritmo de solução das equações do *riser*.

4.3 SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES NO REATOR E NO REGENERADOR

Tanto as equações do reator quanto do regenerador foram resolvidas pelo método de Runge-Kutta de 4ª ordem. Os detalhes da solução destes modelos são apresentados por Melo (2003) e Penteado (2003), respectivamente. Os fluxogramas de solução serão apresentados nas próximas seções.

4.3.1 SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DO REATOR

A Figura 16 mostra o algoritmo de solução das equações do reator. O algoritmo começa com a atribuição de valores iniciais para as variáveis. Em seguida induz-se as condições de contorno para o reator. Além da vazão e temperatura do vapor de *stripping* e pressão de gases após a válvula FV, considera-se que a vazão de gases, catalisador e teores de coque provenientes do *riser* e a pressão no regenerador são condições de contorno para o reator. Igualam-se então os valores presentes aos valores futuros e, na sequência, calcula-se todas as equações algébricas. Em seguida, as equações diferenciais ordinárias (EDO's) são avaliadas para o instante de tempo futuro ($t+1$). Verifica-se se a simulação atingiu o tempo máximo. Caso a simulação não tenha terminado, redefine-se as condições de contorno, atualizam-se os valores presentes e procede-se a solução para um novo instante de tempo.

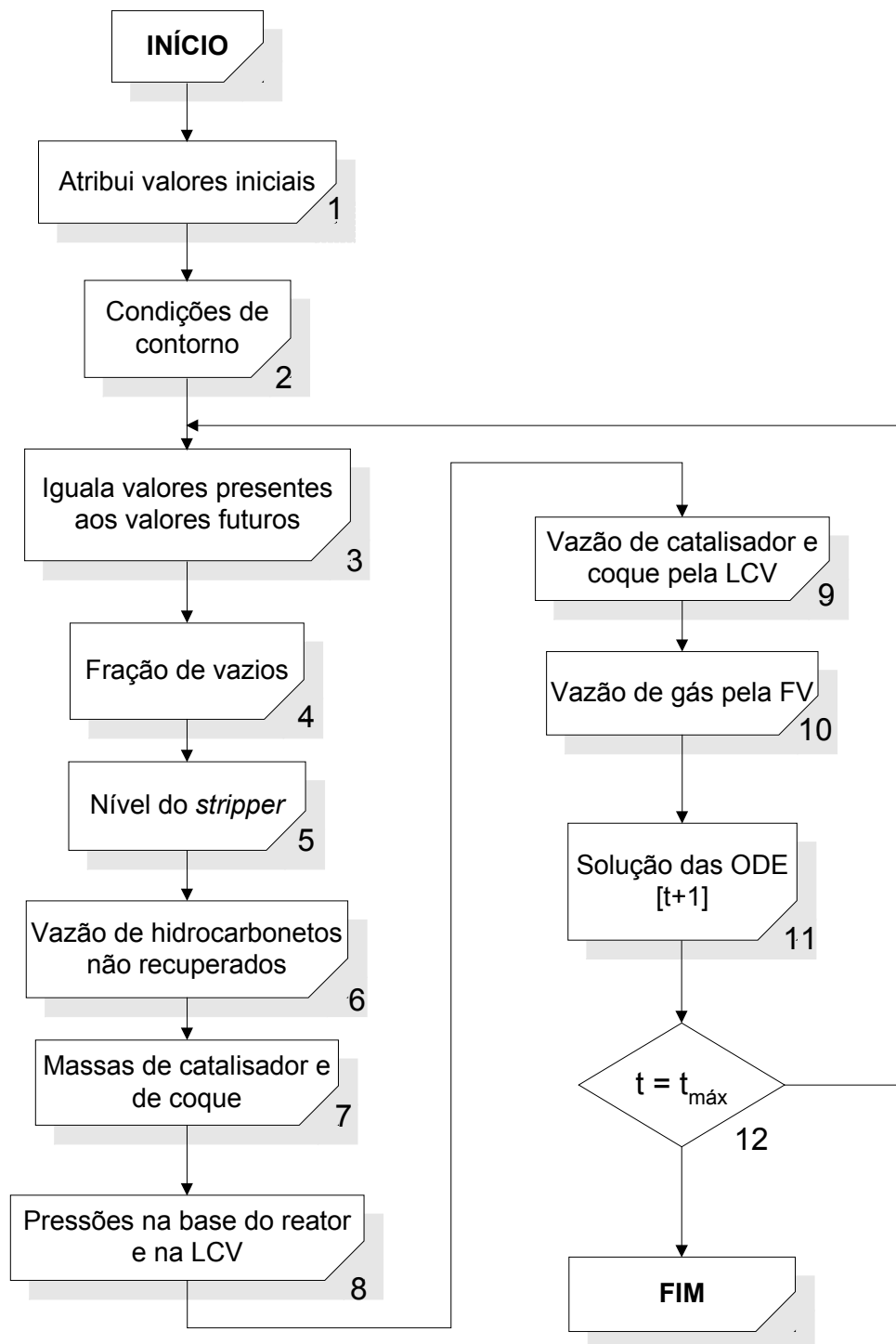


Figura 16 - Algoritmo de solução do reator segundo Melo (2003).

4.3.2 SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DO REGENERADOR

A Figura 17 mostra o algoritmo de solução para as equações do regenerador.

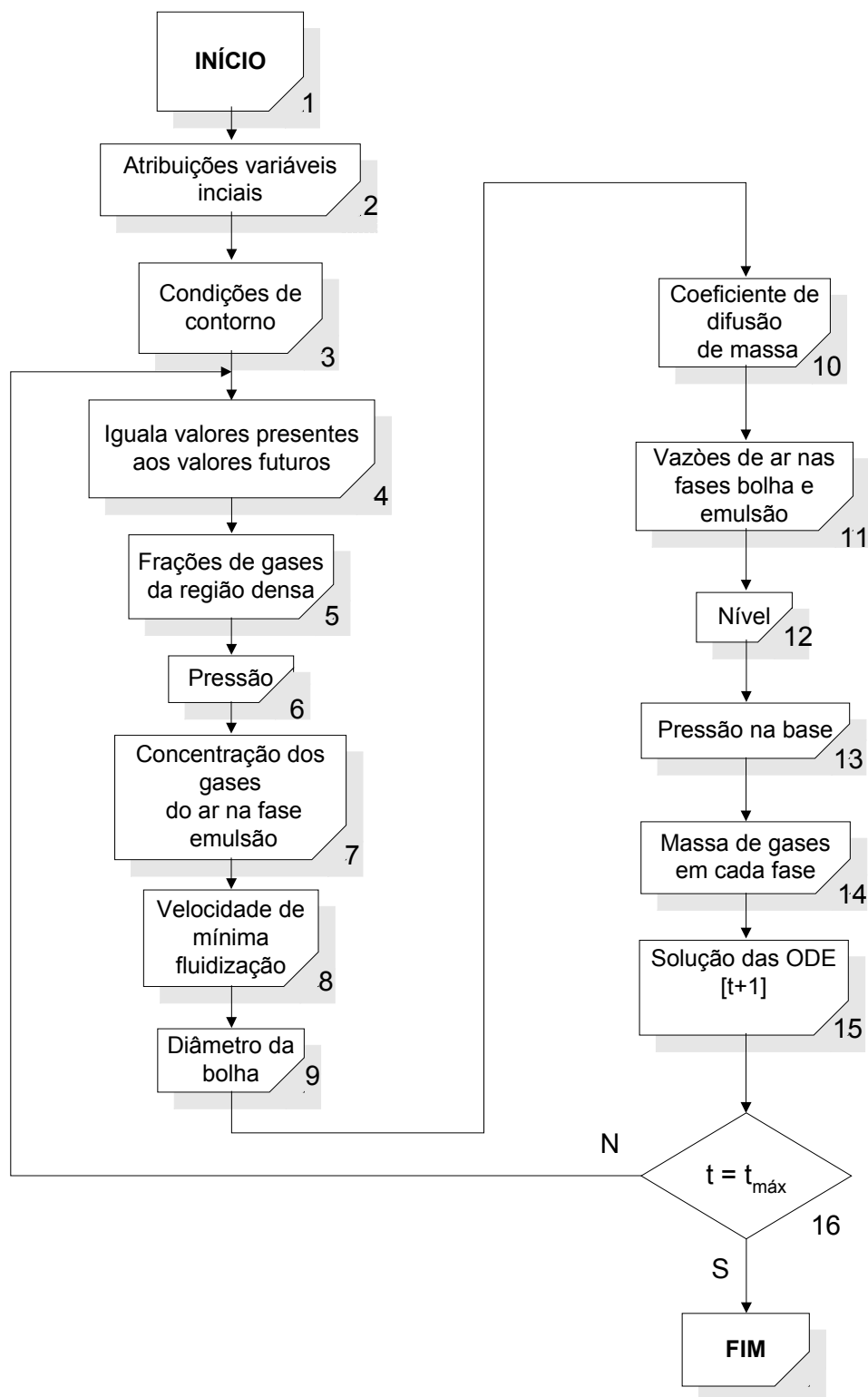


Figura 17 - Algoritmo de solução das equações do regenerador segundo Pentead (2003).

O algoritmo começa com a atribuição de valores iniciais para as variáveis. Em seguida induz-se as condições de contorno para o regenerador: vazões, teores de

coque e temperaturas do catalisador através das válvulas LCV e TCV, pressão a jusante da válvula GV. Igualam-se então os valores presentes aos valores futuros e, na seqüência calcula-se todas as equações algébricas. Em seguida, as equações diferenciais ordinárias (ODE's) são avaliadas para o instante de tempo futuro ($t+1$). Verifica-se se a simulação atingiu o tempo máximo. Caso a simulação não tenha terminado, redefinem-se as condições de contorno, atualizam-se os valores presentes e procede-se a solução para um novo instante de tempo.

4.4 INTEGRAÇÃO DAS SOLUÇÕES

O algoritmo que integra os três componentes do conversor foi montado de forma a dar um caráter explícito no tempo, ou seja, os parâmetros evoluem graças aos valores do instante anterior. Portanto, são estabelecidas previamente as condições iniciais e de contorno coerentes com o comportamento físico-químico do processo. As equações representativas dos modelos são resolvidas de forma seqüencial a cada ciclo do conversor. Neste caso, o algoritmo inicializa resolvendo primeiramente o *riser*, na seqüência o reator e por fim o regenerador, dentro de um mesmo passo de tempo. Este intervalo de tempo é escolhido em função da estabilidade das equações resolvidas pelo método de Runge-Kutta, adotado para resolver as equações do reator e do regenerador.

Como já foi dito neste trabalho, o modelo do *riser* é estacionário (não há inércia de transporte), consideração feita pelo fato do tempo de residência do catalisador ser muito menor que o registrado no reator e no regenerador.

Conforme será visto no capítulo 5, o passo de tempo adotado para resolver as equações do modelo é menor que o tempo de residência das fases no *riser*, considerado como quase-estático. Neste caso, qualquer alteração nas condições de contorno na entrada do *riser* não será imediatamente percebida na sua saída. Para resolver este problema, o algoritmo de solução prevê um atraso nos valores dos parâmetros na saída do *riser*. Este atraso corresponde ao tempo de residência no *riser*. Nos primeiros instantes, com o tempo de simulação (t) menor que o tempo de residência calculado (t_{res}), as condições iniciais no topo do *riser* são mantidas inalteradas. Assim que isto deixa de ser verdadeiro, atribui-se ao valor da variável na saída do *riser* o seu valor calculado no instante t_{res} , ou seja, $\chi(t) = \chi(t - t_{res})$.

A Figura 18 mostra de uma forma geral a seqüência de solução do algoritmo e a Tabela 1 mostra os parâmetros passados de um componente para outro.

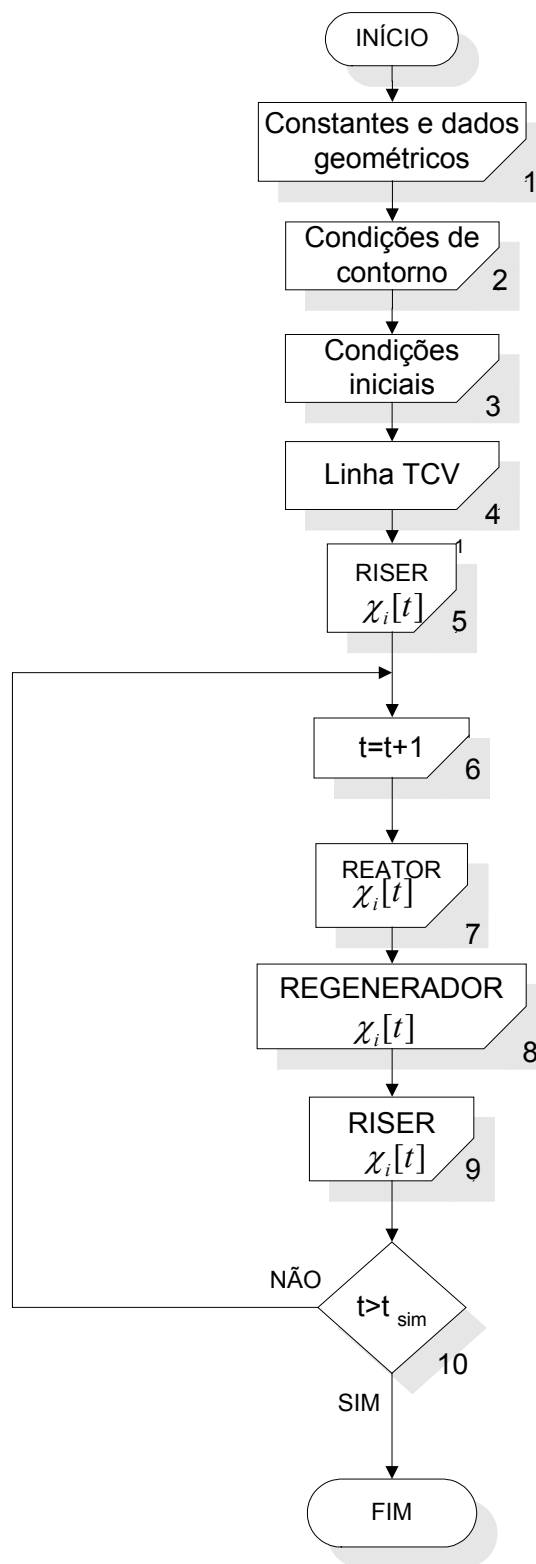


Figura 18 - Algoritmo de solução integrada.

O primeiro módulo estabelece as constantes e dados geométricos utilizados. Em seguida, os módulos 2 e 3 estabelecem as condições de contorno operacionais da planta e as condições iniciais de cada componente. Como o modelo do *riser* é estacionário, não há condições iniciais para as variáveis. É necessário portanto, resolver o modelo para determinar as condições iniciais do *riser*. É por isso que o módulo 5 aparece fora do laço de tempo. Com as condições iniciais estabelecidas, resolvem-se os módulos 7, 8 e 9 ao longo do intervalo de tempo escolhido para a simulação e controlado pelo módulo lógico 10.

Tabela 1 - Algoritmo de solução das equações do modelo do conversor com as respectivas equações.

Procedimento	Variáveis de entrada	Variáveis atualizadas
1 Constantes e dados geométricos		
2 Condições de contorno do conversor	$\dot{m}_{gol}, T_{gol}, Y_{cc}, \dot{m}_{vl}, \dot{m}_{vd}, T_{vl},$ $T_{vd}, \dot{m}_{AR}, T_{AR}, \dot{m}_{v,ST}, T_{v,ST},$ $r_{a,TCV}, r_{a,LCV}, r_{a,FV}, r_{a,GV},$ $P_{j,FV}$	
3 Condições iniciais	$inicia = 1; t=0$	
Inicia Reator	$P_{RA}[0], m_{c,RA}[0], m_{g,RA}[0],$ $T_{RA}[0], w_{cq,RA}[0]$	
Inicia a linha LCV	$\dot{m}_{c,LCV}[0]$	
Inicia regenerador	$P_{RG}[0], y_{i,E}[0], y_{i,B}[0],$ $y_{i,D}[0], m_{c,RG}[0], w_{cq,RG}[0],$ $T_{E,RG}[0], T_{B,RG}[0], \epsilon_{mf,RG}[0]$	

	Inicia a linha	$\dot{m}_{c,TCV}[0]$	
	TCV		
5	Calcula modelo do riser	$P_{RA}[0], P_{b,RG}[0], T_{E,RG}[0],$ $w_{cq,RG}[0]$	$P_{b,RS}[t], y_{i,RS}[t],$ $\dot{m}_{cq,RS}[t], T_{c,RS}[t],$ $T_{g,RS}[t], w_{cq,RS}[t]$
6	Contador de tempo	t	t=t+1
7	Reator	$P_{RG}[t-1], y_{i,RS}[t-1], \dot{m}_{c,RS}[t-1],$ $m_{g,RS}[t-1], \rho_{g,RA}[t-1],$ $T_{c,RS}[t-1], T_{g,RS}[t-1], w_{cq,RS}[t-1]$	$P_{RA}[t], T_{RA}[t], w_{cq,RA}[t], \dot{m}_{c,LCV}[t],$ $\dot{m}_{cq,LCV}[t], m_{g,RA}[t], m_{c,RA}[t],$ $\rho_{g,RA}[t]$
8	Regenerador	$w_{cq,RA}[t-1], \dot{m}_{c,LCV}[t-1],$ $\dot{m}_{cq,LCV}[t-1], \dot{m}_{c,TCV}[t-1],$ $w_{cq,TCV}[t-1], T_{c,TCV}[t-1],$ $T_{c,LCV}[t-1]$	$P_{RG}[t], y_{i,E}[t], y_{i,B}[t], y_{i,D}[t],$ $m_{c,RG}[t], w_{cq,RG}[t], T_{E,RG}[t],$ $T_{B,RG}[t], \varepsilon_{mf,RG}[t], m_{g,RG}[t]$
9	Riser	$P_{b,RG}[t], w_{cq,RG}[t],$ $P_{RA}[t], T_{E,RG}[t]$	$P_{b,RS}[t], y_{i,RS}[t], \dot{m}_{cq,RS}[t],$ $T_{c,RS}[t], T_{g,RS}[t], w_{cq,RS}[t]$
10	Teste do tempo de simulação		
15	FIM		

5 VERIFICAÇÃO DOS MODELOS DO RISER E DO CONVERTOR

5.1 VERIFICAÇÃO DO MODELO DO RISER

Como apresentado no capítulo 4, as equações do modelo do *riser* são resolvidas iterativamente, aplicando os critérios de convergência para os resíduos das equações de conservação da quantidade de movimento e da massa em todos os nós da malha. O espaçamento entre nós precisa ser tão menor quanto maiores

forem os gradientes dos parâmetros. Desta forma, o número de nós aumenta, e conseqüentemente aumenta o tempo de processamento. De maneira a não comprometer a fidelidade do modelo nem a rapidez da simulação, deve-se chegar a um ponto de equilíbrio que satisfaça a estas duas exigências.

Através da análise de um resultado prévio do modelo, utilizando uma distribuição de malha uniforme, constata-se que as maiores variações ocorrem próximo à base do *riser*. Como conseqüência desta observação, optou-se pela aplicação de uma malha não uniforme, representada pela equação:

$$\Delta z = k \frac{L_{RS}}{C_1 + \frac{C_2}{\exp(z^2)}} \quad (165)$$

onde Δz é o espaçamento da malha, avaliado em função da posição z no *riser*, k é um fator de escala e L_{RS} é o comprimento do *riser*. C_1 e C_2 são constantes avaliadas empiricamente de forma a se chegar na melhor distribuição possível. A Figura 19 ilustra as curvas representativas dos valores de Δz em função de z para diversos números de pontos da malha. A variação do número de pontos da malha é obtida pela mudança do fator de escala k .

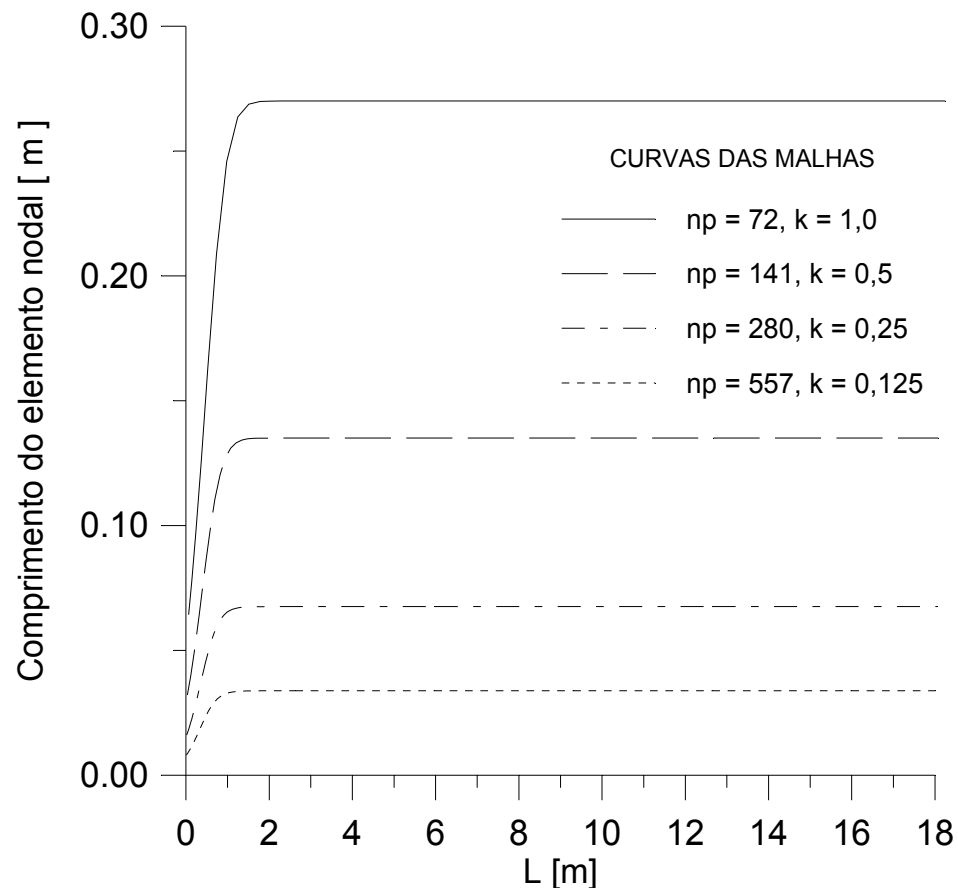


Figura 19 - Diferentes malhas para o *riser*.

5.1.1 ESCOLHA DO TAMANHO DA MALHA E DO CRITÉRIO DE CONVERGÊNCIA

Para verificar a independência das soluções com o tamanho de malha e o critério de convergência adotado, é necessário fazer algumas análises de sensibilidade. As Figuras 20, 21 e 22 apresentam, respectivamente, resultados de pressão, temperatura e velocidade ao longo do *riser* para diferentes critérios de convergência para 72 nós. A pressão e a temperatura mostram resultados muito parecidos, independentemente do critério adotado. A velocidade entretanto, apresenta oscilação ao longo do *riser*, para critério de convergência de 1%. Independente da malha, estas oscilações sempre acontecem para o critério de convergência de 1% ou acima deste valor.

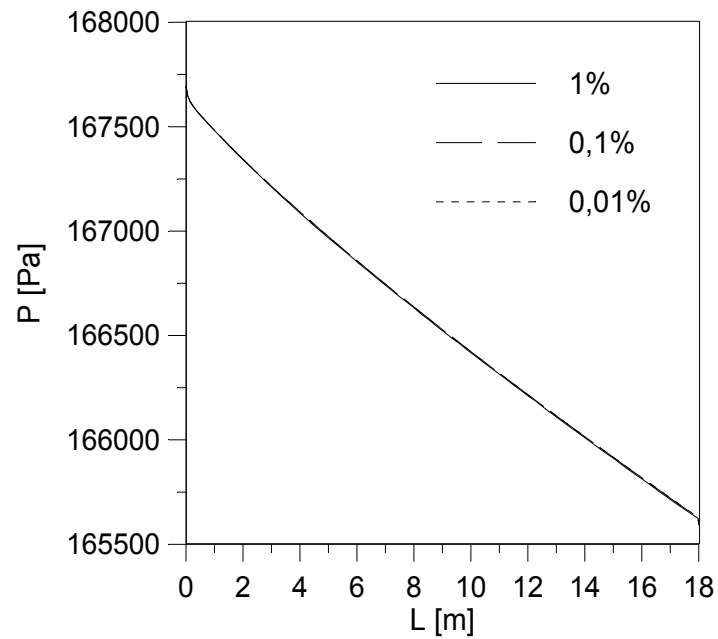


Figura 20 - Variação da pressão ao longo do *riser* para diferentes critérios de convergência e 72 elementos nodais.

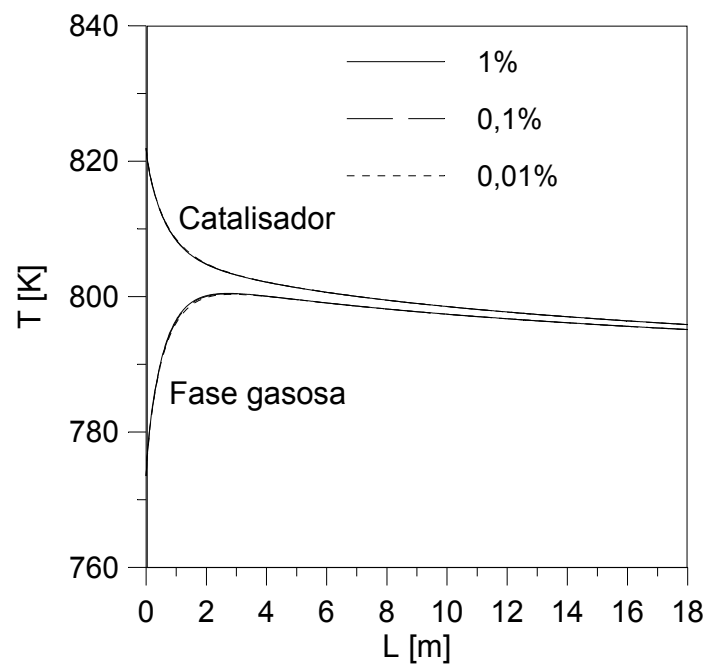


Figura 21 – Variação da temperatura ao longo do *riser* para diferentes critérios de convergência e 72 elementos nodais.

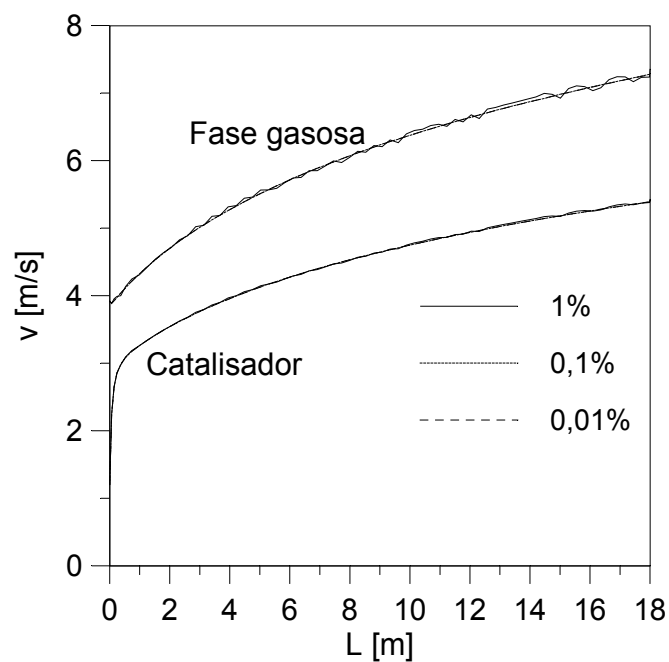


Figura 22 – Variação das velocidades de gás e de sólido ao longo do *riser* para diferentes critérios de convergência e 72 elementos nodais.

Na sequência foi feita uma análise de sensibilidade da malha para os critérios de convergência de 0,1 e 0,01 %. Para isto, utilizou-se malhas com os seguintes números de pontos: 72, 141, 280 e 557. Os resultados estão mostrados nas Figuras 23 a 28.

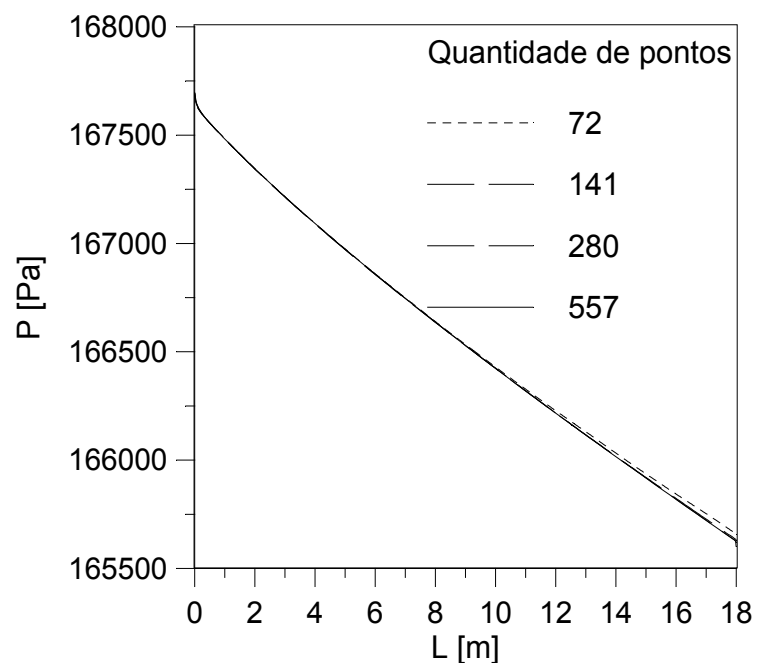


Figura 23 - Variação de pressão ao longo do *riser* em função do número de pontos e critério de convergência de 0,1%.

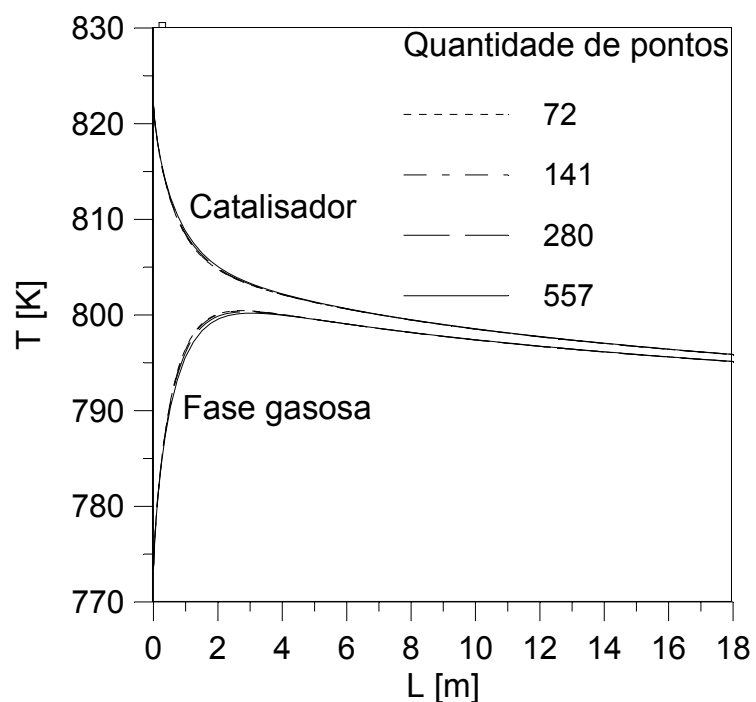


Figura 24 –Variação das temperaturas ao longo do *riser* em função do número de pontos e critério de convergência de 0,1 %.

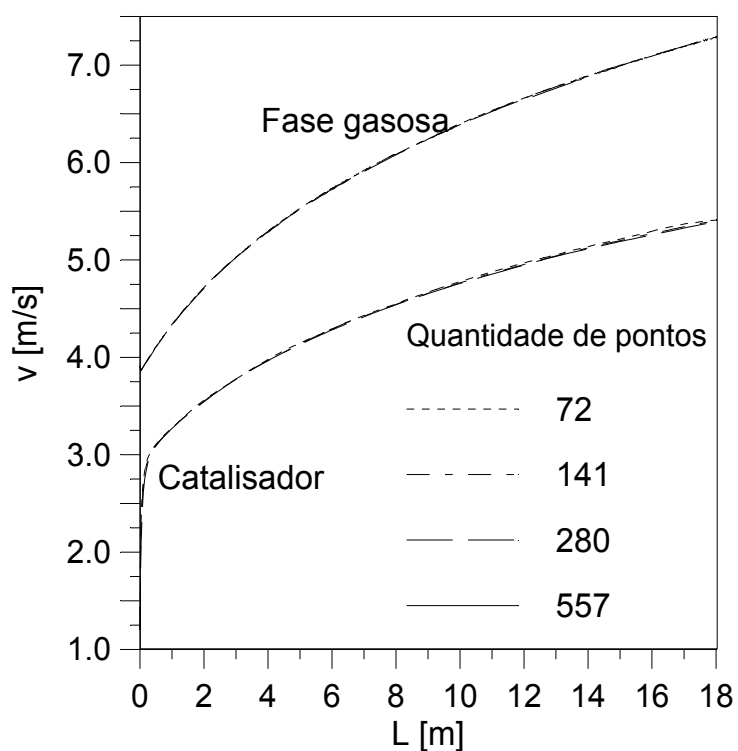


Figura 25 - Variação das velocidades das fases para diferentes malhas e critério de convergência de 0,1 %.

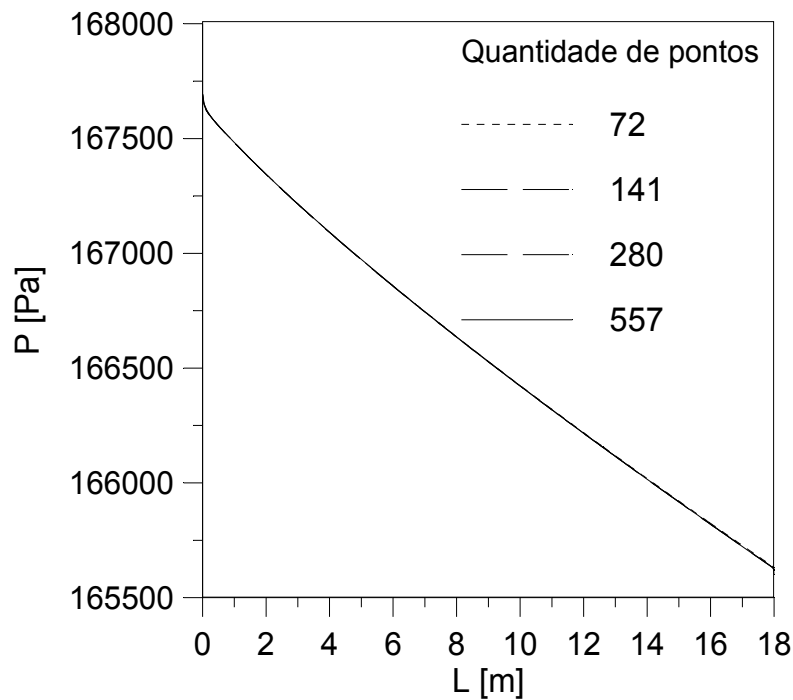


Figura 26 – Variação da pressão ao longo do *riser* em função do número de pontos e critério de convergência de 0,01%

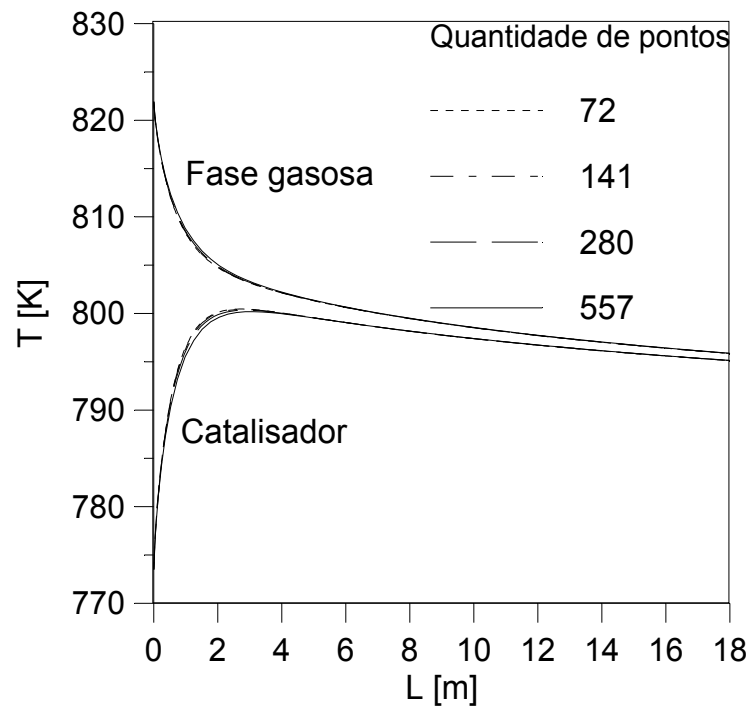


Figura 27 – Variação das temperaturas das fases ao longo do *riser* em função do número de pontos e critério de convergência de 0,01 %.

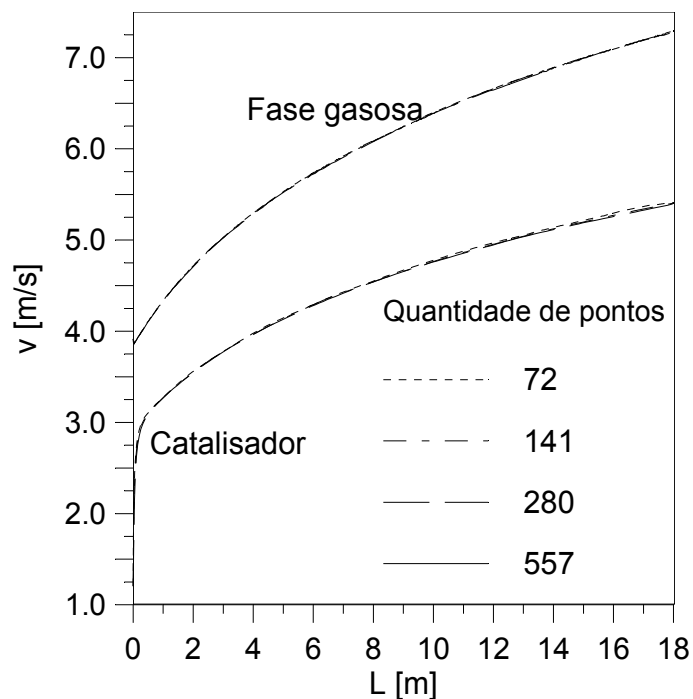


Figura 28 – Variação das velocidades das fases para diferentes malhas e critério de convergência de 0,01 %.

Como se vê, existe uma variação muito pequena dos resultados em relação aos números de pontos da malha. A Tabela 2 mostra os valores de algumas variáveis na saída do *riser*. Observa-se nestes valores numéricos que as diferenças são mínimas e que a solução já se encontra independente da malha com 72 pontos e critério de convergência de 0,1 %.

Tabela 2 – Valores de algumas variáveis na saída do *riser* em função da malha e dos critérios de convergência escolhidos.

Número de pontos	P [Pa]		vg [m/s]	vc	vg	vc
	0,10%	0,01%	0,10%	0,10%	0,01%	0,01%
557	165600,9	165602,6	7,292	5,405	7,271	5,407
280	165619,3	165619,1	7,292	5,405	7,289	5,401
141	165626,9	165621,8	7,297	5,409	7,292	5,406
72	165656,9	165630,3	7,296	5,410	7,291	5,409

Número de pontos	Tg [K]	Tc	Tg	Tc
	0,10%	0,10%	0,01%	0,01%
557	795,074	795,805	795,073	795,805
280	795,103	795,836	795,103	795,836
141	795,107	795,839	795,104	795,836
72	795,130	795,865	795,116	795,849

Número de pontos	go	gl	gc	cq
	0,10%	0,10%	0,10%	0,10%
557	0,48398	0,33122	0,06742	0,0312
280	0,48442	0,33097	0,06725	0,0312
141	0,48396	0,33135	0,06730	0,0312
72	0,48405	0,33131	0,06727	0,0312

go - gasóleo
gl - gasolina
gc - gás combustível
cq - coque

Número de pontos	go	gl	gc	cq
	0,01%	0,01%	0,01%	0,01%
557	0,48398	0,33122	0,06742	0,0312
280	0,48442	0,33096	0,06725	0,0312
141	0,48397	0,33135	0,06730	0,0312
72	0,48406	0,33130	0,06726	0,0312

É importante ressaltar que o tempo de processamento aumenta com o aumento do número de pontos da malha e com a redução do critério de convergência. É natural portanto, que se escolha a combinação que garanta a estabilidade da solução e que proporcione o menor tempo de processamento.

Como já dito anteriormente, o presente trabalho tem por objetivo analisar as variáveis do escoamento no *riser* e simular dinamicamente o conversor como um todo. No caso do conversor, é muito importante que a simulação seja rápida, já que a intenção é acompanhar o processo de craqueamento em tempo real.

Baseado no exposto acima, deve-se escolher malhas e critérios de convergência para duas situações: para o modelo do *riser* simulado separadamente e quando acoplado ao conversor. A Tabela 3 estabelece os valores destes parâmetros para cada caso. Escolheu-se a malha mais refinada e o critério de convergência mais rigoroso para simulação do *riser*, garantindo assim uma maior fidelidade dos resultados, em detrimento de um maior tempo de processamento. Para o modelo do conversor, escolheu-se a malha menos refinada e o critério de convergência menos rigoroso.

Tabela 3 - Malhas e critérios de convergência para os modelos do *riser* e do conversor.

modelos	Número de pontos da malha	Critério de convergência
<i>riser</i> isolado	557	0,01%
<i>riser</i> no conversor	72	0,1%

5.2 VERIFICAÇÃO DO MODELO DO CONVERSOR

Para comprovar a consistência do modelo dinâmico, deve-se verificar a sua independência em relação ao passo de tempo e às diferentes condições iniciais.

5.2.1 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DO PASSO DE TEMPO

Para se verificar a independência dos resultados do modelo com o tempo, simula-se o processo a partir de uma condição inicial qualquer utilizando os seguintes passos de tempo: 0,2, 0,1 e 0,05 s, mantendo as mesmas condições iniciais. O objetivo consiste em identificar o maior passo de tempo possível de ser utilizado sem comprometer os resultados de forma a proporcionar o menor tempo de simulação possível.

Após algumas simulações, verifica-se que, para passos de tempo maiores que 0,2 s, a solução do modelo do regenerador torna-se instável. Soluções com passo de tempo maior do que 0,2 s são então desconsideradas. A Figura 29 mostra a evolução das vazões de catalisador gasto e regenerado considerando os três passos de tempo. Por serem mais sensíveis que as outras variáveis, elas foram

escolhidas para mostrar que os resultados do modelo não sofrem alterações significativas para os três passos de tempo utilizados. Isto já era esperado, em função dos métodos numéricos aplicados para solução do modelo.

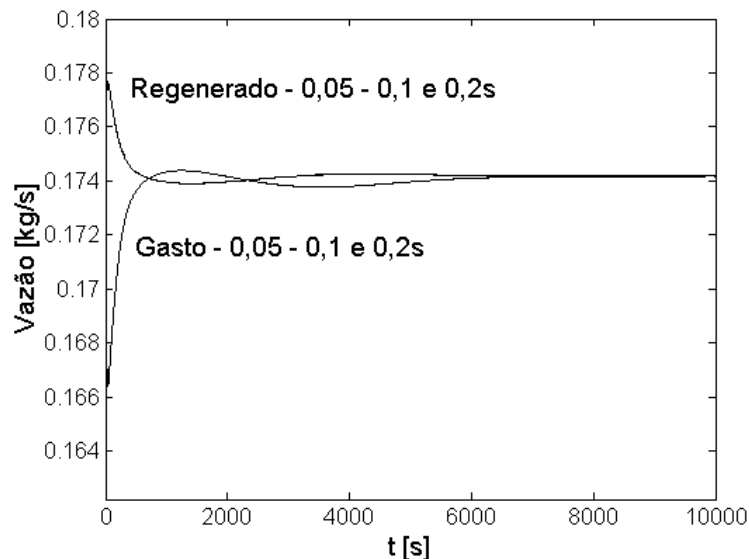


Figura 29 - Vazões de catalisador gasto e regenerado.

Para as demais variáveis, cujos resultados encontram-se ilustrados no capítulo 6, também se mostraram consistentes independentemente do passo de tempo escolhido.

5.2.2 INDEPENDÊNCIA DAS CONDIÇÕES INICIAIS

Como forma de verificar se os resultados em regime permanente são únicos, foram realizadas simulações para dois valores diferentes de condições iniciais da temperatura do regenerador. Para cada simulação, os seguintes parâmetros foram monitorados:

- ✓ Temperatura do regenerador;
- ✓ Temperatura do reator;
- ✓ Pressão do regenerador.

A Figura 30 mostra a evolução da temperatura do regenerador a partir de duas diferentes condições iniciais: 1000 K e 960 K. Como se vê, ambas as simulações

convergem após 170 minutos para a mesma temperatura final de 980 K em regime estacionário.

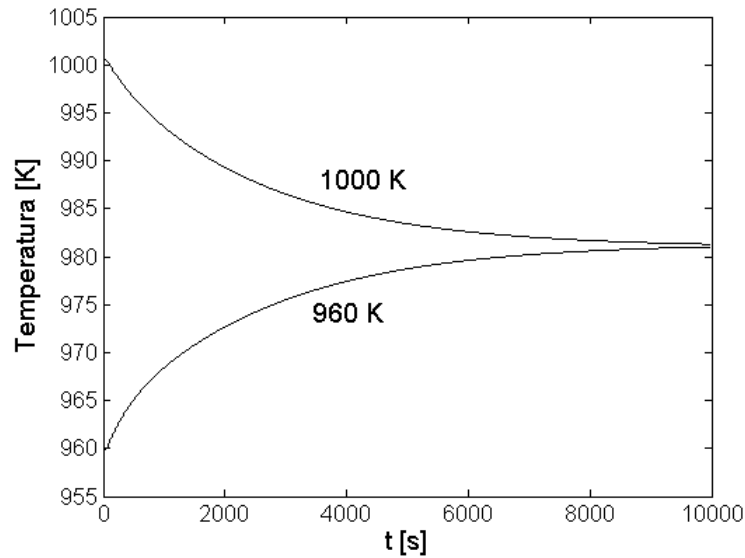


Figura 30 - Resposta dinâmica da temperatura do regenerador para duas condições iniciais.

Com a temperatura inicial de 802 K no reator, (Figura 31) e com as mesmas condições iniciais impostas ao regenerador, as simulações levaram ao mesmo patamar de temperatura que está em torno de 803 K.

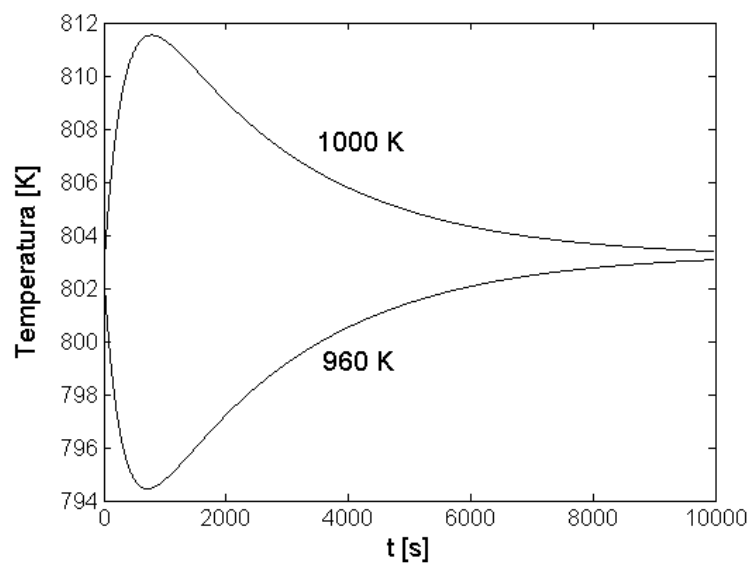


Figura 31 - Resposta dinâmica da temperatura no reator para diferentes condições iniciais da temperatura do regenerador.

Para a pressão no regenerador, cuja condição inicial era de 186947 Pa, observou-se o mesmo comportamento em relação às outras variáveis, ou seja, independentemente da temperatura inicial do regenerador, a pressão estabiliza num mesmo valor.

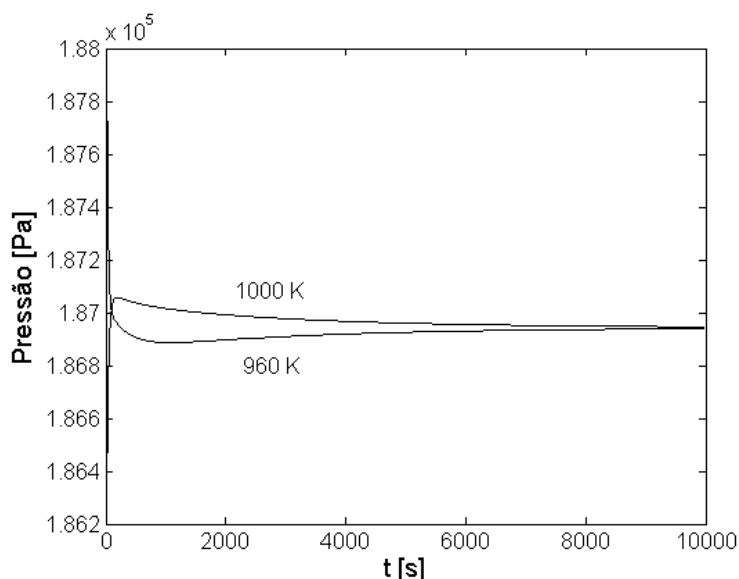


Figura 32 - Resposta dinâmica da pressão para duas temperaturas iniciais do regenerador.

5.2.3 COMPARAÇÃO EM REGIME ESTACIONÁRIO

Neste item são apresentados alguns resultados do modelo estacionário do *riser*. Para isto, foram adotados os dados geométricos e condições de operação da planta piloto da SIX (Superintendência da Industrialização do Xisto – Unidade de Negócios da PETROBRAS em São Mateus do Sul). O modelo cinético utilizado para se avaliar a evolução da composição da fase gasosa foi o de Han e Chung (2000).

A Tabela 4 mostra os principais dados geométricos da planta piloto da SIX, assim como as propriedades da carga e do catalisador utilizado.

Tabela 4 - Principais parâmetros geométricos e operacionais da planta.

1 – Geometria	altura do <i>riser</i>	18	m
	diâmetro do <i>riser</i>	0.0508	m

2 – Dados da carga	temperaturas de destilação		K
	T10	372	K
	T30	432	K
	T50	483	K
	T70	568	K
	T90	667	K
	resíduo de carbono Conradson	0,5	%peso
3 - Propriedades do catalisador	massa específica	1400	kg/m ³
	diâmetro médio	70	μm
	calor específico	1,1095	kJ/kgK
	esfericidade	1	-

A Tabela 5 mostra as condições de contorno utilizadas na simulação.

Tabela 5 - Condições de contorno da planta.			
1 – Temperaturas	ambiente	296	K
	vapor <i>lift</i> e de dispersão	470	K
	vapor <i>stripper</i>	503	K
	ar para regenerador	308	K
	carga	573	K
2 – Vazões	carga	0,025075	kg/s
	vapor lift/dispersão	0,002511	kg/s
	vapor <i>stripper</i>	0,002083	kg/s
	ar regenerador	0,0486	kg/s

De forma a obter a mesma condição de funcionamento da planta piloto, as seguintes variáveis são controladas:

- ✓ Pressão no topo do reator;
- ✓ Diferencial de pressão reator-regenerador e conseqüentemente a pressão no regenerador;
- ✓ Massa de catalisador no reator.

Embora a vazão de catalisador não seja controlada, ajusta-se uma abertura da TCV correspondente à vazão observada na planta. Isto já é o suficiente para manter a vazão inalterada, já que as pressões no regenerador e no reator são controladas.

Após implementar os ajustes acima, o modelo foi simulado até atingir o regime estacionário, mostrado na Tabela 6. Estes resultados mantiveram-se inalterados durante todo o tempo restante da simulação. Como observado na seção 6.2.1, a planta atinge o equilíbrio assim que a relação entre as vazões de entrada de catalisador, coque e ar no regenerador se torna inalterada. Isto de certa forma garante também que o equilíbrio térmico tenha se estabelecido, já que, para haver variação na taxa de coque formado no *riser* é necessário que haja alteração nas condições de queima do regenerador.

Tabela 6 - Resultados da comparação dos resultados da planta e do modelo em regime estacionário.

Variável		Planta	Modelo	Un
1 – Massa de catalisador	reator	50	50	kg
	regenerador	200	200	kg
2 - Teor de coque	catalisador gasto	1,415	1,279	%
	regenerado	0,048	0,0687	%
3 - Temperaturas	vaso separador	793	818	K
	<i>stripper</i>	793	818	K

	regenerador	988	992	K
	<i>riser</i> topo	817	826	K
	<i>riser</i> base	841	880	K
	gases combustão	900	992	K
4 – Pressão	regenerador	186906	186906	Pa
	reator – topo	156906	156906	Pa
	<i>stripper</i> – base	169655	165479	Pa
	<i>riser</i> – topo	156906	156905	Pa
	<i>riser</i> – base	167694	158878	Pa
	montante – LCV	226534	226043	Pa
	Dif pressão VS- RG	30000	30000	Pa
5 - Vazão	gases combustão	0,0574	0,0476	kg/s
	relação C/O	5,43	5,43	-
	TCV	0,136	0,136	kg/s
6 – Composição	CO			
	gases	0	0,34	%
	combustão			
	CO ₂	8,31	6,8	%
	N ₂	79,566	77,47	%
	O ₂	11,166	11,82	%

Os valores em negrito são controlados. As discrepâncias podem estar relacionadas tanto ao modelo quanto às medições. Considerações quanto à cinética das reações e dos leitos fluidizados podem ser as principais fontes de erros nos modelos.

No caso da vazão dos gases de combustão no regenerador, a proximidade dos valores reflete coerência na taxa de gases formados. Como mostrado, a vazão calculada ficou em torno de 10% abaixo do medido. Considerando que a cinética de combustão é confiável, a diferença pode ser consequência da menor produção de gases quando comparada à de um modelo que contemple a região diluída do regenerador. Em relação à composição dos gases de combustão, pode-se verificar que a condição de queima é semelhante à registrada na planta.

6 POTENCIALIDADES DOS MODELOS DO RISER E DO CONVERSOR

Após a realização dos testes para a escolha de tamanho de malha e do critério de convergência no *riser* e o passo de tempo para o conversor, esta seção apresenta alguns resultados do modelo do *riser* e do conversor.

6.1 POTENCIALIDADES DO MODELO DO RISER

As Figuras 33 e 34 mostram as mudanças das temperaturas das fases e das frações dos *lumps* ao longo do *riser*. Como o catalisador fornece a energia para as reações, ocorre a vaporização da carga de gasóleo, a sua massa específica é reduzida e conseqüentemente a velocidade do gás aumenta. Assim, o gás arrasta a fase sólida ao longo do *riser*. Como ilustrado na Figura 33, a diferença da temperatura entre as fases é maior na entrada do *riser*, ocorrendo assim uma alta taxa de transferência de calor.

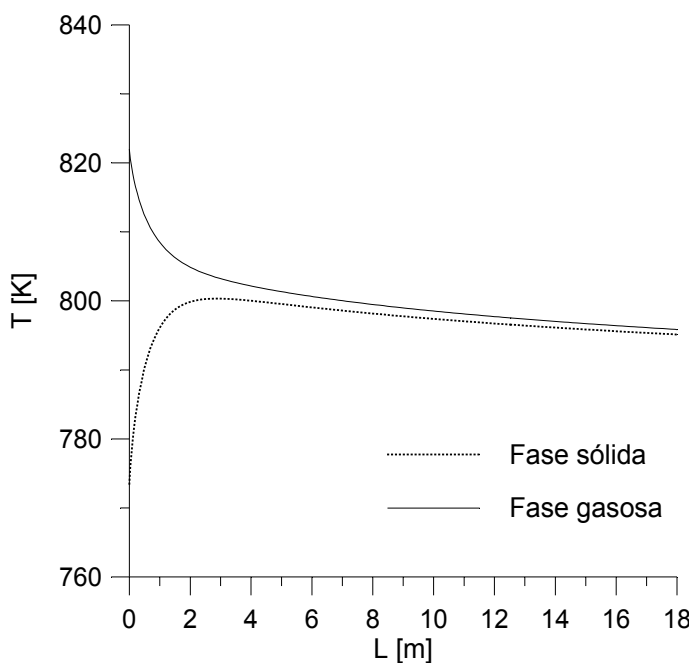


Figura 33 - Temperaturas das fases sólida e gasosa ao longo do *riser*.

Com isso, a temperatura do catalisador diminui e a da fase gasosa aumenta, passando a existir uma pequena diferença entre elas, sustentada pela continuidade das reações endotérmicas de craqueamento. Estas reações tendem a diminuir a temperatura da fase gasosa, garantindo a existência do fluxo de calor da fase sólida, provocando também a redução da sua temperatura.

A Figura 34 mostra, como esperado, a redução da fração do gasóleo e o aumento das frações dos demais três *lumps*. A mudança da composição é uma função das reações endotérmicas de craqueamento.

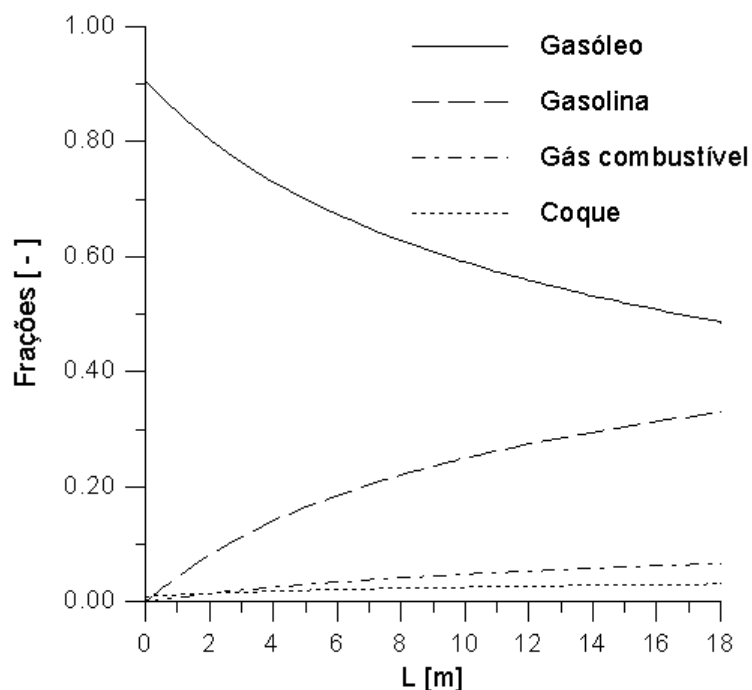
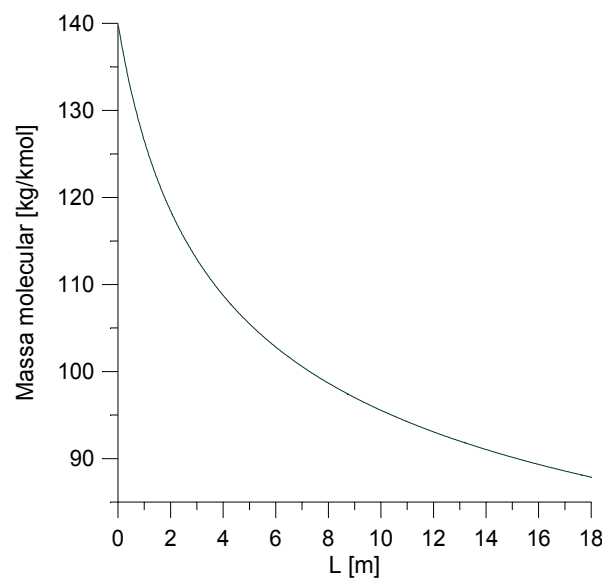
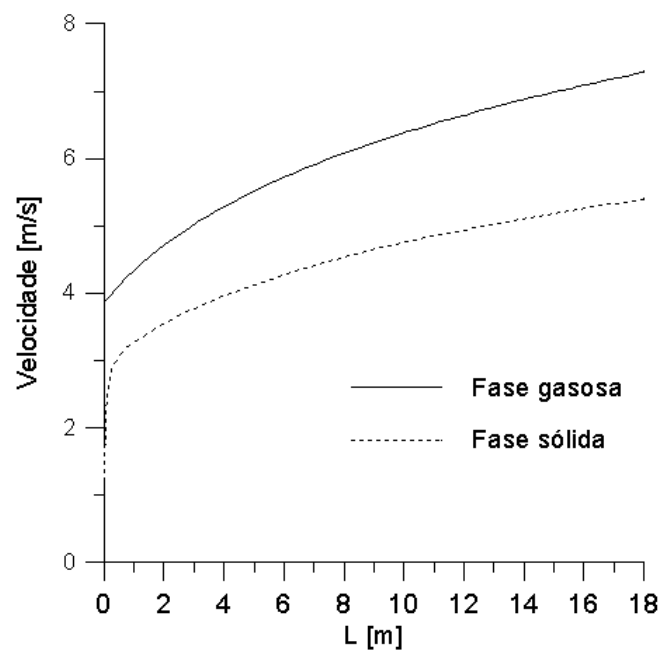


Figura 34 - Frações de *lumps* ao longo do *riser*.

Uma vez que o *riser* é adiabático, as temperaturas caem em consequência das reações endotérmicas. Em função das reações, a massa molecular média da fase gasosa diminui, como mostrado na Figura 35.

Figura 35 - Massa molecular da fase gasosa ao longo do *riser*.Figura 36 - Velocidades das fases ao longo do *riser*

Enquanto o gás acelera, o catalisador é arrastado ao longo do *riser*. Como se pode notar na Figura 36, as velocidades do gás e do catalisador aumentam mais rapidamente próximo à entrada do *riser*. Esta é uma consequência do elevado gradiente da massa específica do gás naquela região, que varia com a temperatura e a massa molecular da fase gasosa. Em função da diferença entre as velocidades e da mudança da massa específica do gás, ocorre o aumento da fração de vazios ao

longo do *riser*, mostrado na Figura 37. Note que o valor da variável nesta figura é apresentado apenas para os cinco metros iniciais do *riser*, onde sua variação é mais expressiva.

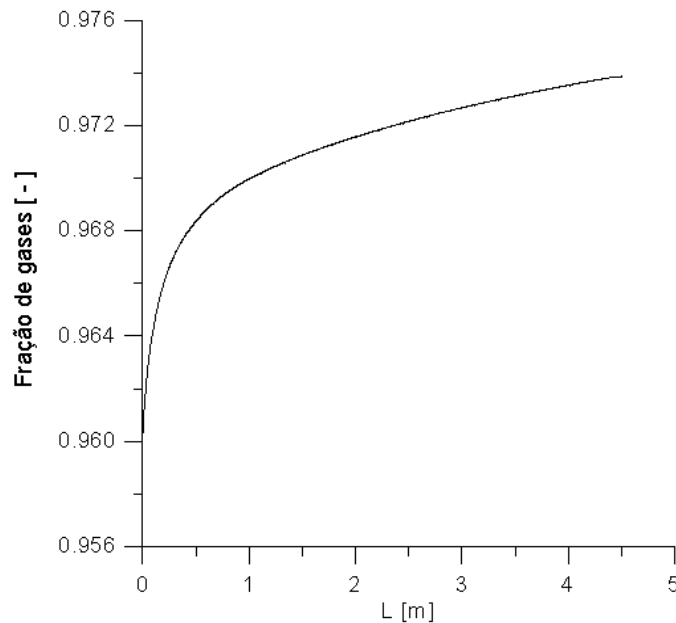


Figura 37 - Fração de vazios ao longo do *riser*

A Figura 38 mostra a variação da pressão ao longo do *riser*. Com exceção da região próxima à entrada do *riser*, o gradiente de pressão é quase constante ao

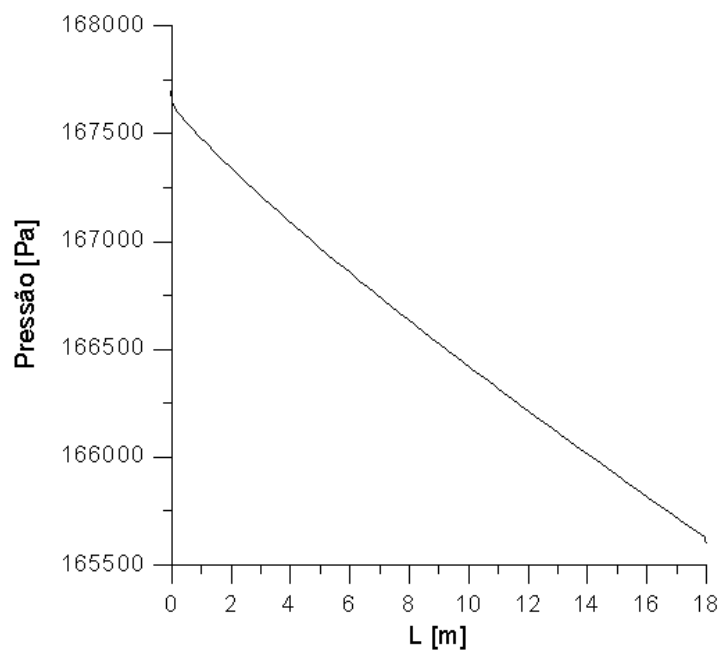


Figura 38 - Pressão ao longo do *riser*.

longo do seu comprimento.

Os efeitos da temperatura de entrada do catalisador nas frações de *lumps*, na taxa de conversão e no tempo de residência também foram investigados. A Tabela 7 mostra algumas variáveis de saída em função da mudança na razão catalisador/gás-óleo (C/O) para duas temperaturas de entrada do catalisador (950 e 970 K).

Segundo o modelo em estudo, a dinâmica do escoamento no *riser* depende basicamente da relação entre a área superficial de catalisador disponível (função da quantidade de catalisador e de coque agregado) e da temperatura. A cinética de formação de coque é função da temperatura e do tempo de contato entre o catalisador e o gás-óleo. Um elevado teor de coque tende a bloquear as reações endotérmicas, diminuindo o fluxo de calor para a fase gasosa, evitando que a temperatura do catalisador varie muito. Uma temperatura elevada tende a provocar uma queda maior na massa molecular, e, por consequência uma diminuição no tempo de residência do catalisador. Vejamos se os resultados apresentados na Tabela 7 correspondem ao esperado.

Um aumento de 20 K na temperatura da entrada do catalisador provoca um aumento médio de 5,50 % na conversão de gasolina (Figura 39). Conseqüentemente, esta variável é muito importante para controlar a conversão. Uma vez que a energia disponível é mais elevada em 970 K, o tempo de residência diminui. Isto é uma consequência de uma variação mais elevada da massa específica do gás que provoca a aceleração do escoamento. Sugere-se com isso que, com a redução do tempo de residência, não houve tempo suficiente para que toda a energia se transferisse para a fase gasosa em função da resistência térmica entre as fases, ocasionando valores mais altos da temperatura na saída.

Aumentado a relação C/O, para uma mesma temperatura de entrada de catalisador (vamos supor 970 K) , aumenta-se a área superficial de catalisador, o que é vantajoso para a conversão. Note que a conversão dobra quando da variação da relação C/O de 2,0 para 8,0. Note também que, no entanto, a taxa de aumento da conversão diminui com o aumento da relação C/O, de 28,2% para 3,3%. Isto se justifica pelo maior peso provocado pela diminuição do tempo de residência em relação à quantidade de catalisador disponível.

Tabela 7 - Efeito da razão catalisador/óleo e temperatura de entrada de catalisador nos parâmetros do *riser*.

C/O	Temperatura do catalisador			Conversão de gasolina			Variação da conversão com C/O	
	[K]			[%]			[%]	
	Tc			Tc				
	950 K	970 K	[k]	950 K	970 K	[%]	950 K	970 K
2,0	638,0	642,4	4,4	13,2	14,0	6,3		
2,8	658,1	663,1	4,9	17,0	18,0	6,0	28,6	28,2
3,6	673,0	678,4	5,4	19,9	21,0	5,7	17,0	16,8
4,4	684,7	690,6	5,9	22,1	23,4	5,6	11,5	11,3
5,2	694,3	700,5	6,2	24,0	25,3	5,4	8,3	8,2
6,0	701,6	708,1	6,5	25,8	27,2	5,3	7,7	7,6
6,8	709,5	716,4	6,9	26,7	28,1	5,2	3,5	3,5
7,6	715,7	722,8	7,2	27,9	29,3	5,1	4,2	4,1
8,4	721,2	728,6	7,4	28,8	30,3	5,0	3,4	3,3

C/O	Fração de coque			Tempo de residência		
	[kg/kg]			[s]		
	Tc			Tc		
	950 K	970 K	[%]	950 K	970 K	[s]
2	0,023775	0,023936	0,68	5,6	4,8	-0,8
2,8	0,017536	0,017621	0,48	5,6	4,8	-0,8
3,6	0,013904	0,013950	0,33	4,9	4,4	-0,5
4,4	0,011530	0,011554	0,21	4,5	4,1	-0,4
5,2	0,009860	0,009871	0,11	4,2	4,0	-0,2
6	0,008675	0,008678	0,03	3,8	3,7	-0,1
6,8	0,007662	0,007661	-0,01	3,7	3,5	-0,2
7,6	0,006911	0,006904	-0,10	3,5	3,4	-0,1
8,4	0,006295	0,006287	-0,13	3,5	3,3	-0,2

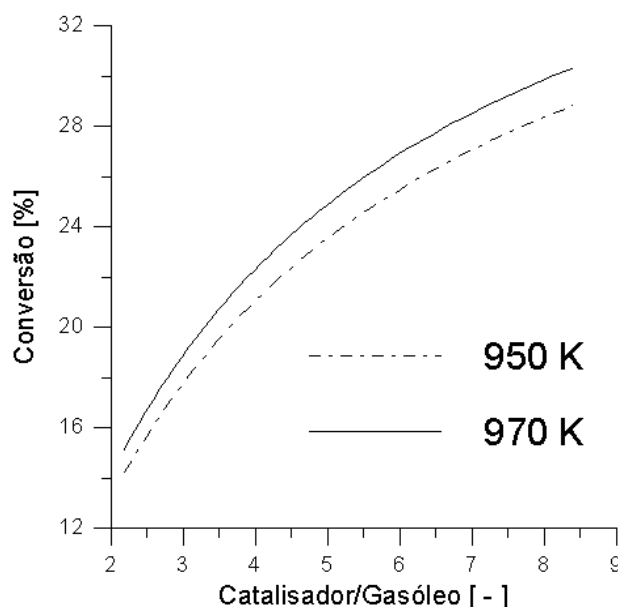


Figura 39 - Taxa de conversão em função da razão catalisador/gasóleo para duas temperaturas de entrada de catalisador.

No caso do coque, vale uma análise mais precisa. Note que para baixas relações C/O, quando aumentamos a temperatura de 950 K para 970 K, a cinética e o alto tempo de residência contribuem para seu aumento. A medida que a relação C/O aumenta, as temperaturas também aumentam, favorecendo a cinética de formação. Por outro lado, a diminuição do tempo de residência tende a influenciar o processo com maior peso, não havendo tempo suficiente para manter a mesma razão de formação. Veja que com C/O igual a 2 a variação é de 0,68 % e para C/O igual a 8,4 tem-se uma queda de 0,13 % de teor de coque quando a temperatura do catalisador varia de 950 K para 970 K.

O efeito de uma redução de 10% na fração do coque do gasóleo também foi analisado. Como pode ser visto na Tabela 8, quanto menos coque existir, maiores são as taxas de conversão. Com pouca quantidade de coque no catalisador, aumenta-se a eficiência das reações endotérmicas de craqueamento, promovendo uma diminuição mais acentuada da temperatura do catalisador na saída do *riser*. A fração do coque diminui e o tempo de residência diminui.

Tabela 8 - Efeito da razão catalisador/gasóleo e do coque na carga de alimentação nos parâmetros do *riser*.

C/O	Temperatura do catalisador			Taxa de conversão		
	[K]			[%]		
	Ycc			Ycc		
	0,028	0,0252	[K]	0,028	0,0252	[%]
2,0	638,0	637,9	-0,1	13,2	13,2	0,38
2,8	658,1	658,0	-0,1	17,0	17,0	0,31
3,6	673,0	672,8	-0,2	19,9	19,9	0,28
4,4	684,7	684,5	-0,2	22,1	22,2	0,27
5,2	694,3	694,1	-0,2	24,0	24,0	0,26
6,0	701,6	701,3	-0,2	25,8	25,9	0,25
6,8	709,5	709,3	-0,3	26,7	26,8	0,25
7,6	715,7	715,4	-0,3	27,9	28,0	0,25
8,4	721,2	720,9	-0,3	28,8	28,9	0,24

C/O	Fração de coque			Tempo de residência		
	[kg/kg]			[s]		
	Ycc			Ycc		
	0,028	0,0252	[%]	0,028	0,0252	[s]
2,0	0,024	0,022	-5,77	5,6	4,8	-0,8
2,8	0,018	0,017	-5,58	5,6	4,8	-0,8
3,6	0,014	0,013	-5,47	4,9	4,4	-0,5
4,4	0,012	0,011	-5,39	4,5	4,1	-0,4
5,2	0,010	0,009	-5,33	4,2	4,0	-0,2
6,0	0,009	0,008	-5,24	3,8	3,7	-0,1
6,8	0,008	0,007	-5,25	3,7	3,5	-0,2
7,6	0,007	0,007	-5,21	3,5	3,4	-0,1
8,4	0,006	0,006	-5,16	3,5	3,3	-0,2

6.2 POTENCIALIDADES DO MODELO DO CONVERSOR

Como forma de apresentação dos resultados do conversor, primeiramente é mostrado o comportamento de algumas variáveis envolvidas a partir de uma condição inicial qualquer até o estabelecimento do regime estacionário. Estes resultados são os mesmos da simulação citada na seção de verificação da sensibilidade do passo de tempo. Em seguida é feita uma verificação das potencialidades dinâmicas do modelo sob a ação do algoritmo de controle.

6.2.1 COMPORTAMENTO DO MODELO DURANTE O RESTABELECIMENTO DO REGIME ESTACIONÁRIO

O propósito deste item é de mostrar a evolução de algumas variáveis a partir de uma condição qualquer de desequilíbrio do balanço térmico e de massa sem a influência do algoritmo de controle ou de qualquer perturbação. A Figura 40 mostra a evolução das vazões de catalisador gasto e regenerado. Estas vazões dependem dos diferenciais de pressão entre o regenerador e o vaso separador, ilustradas na Figura 41.

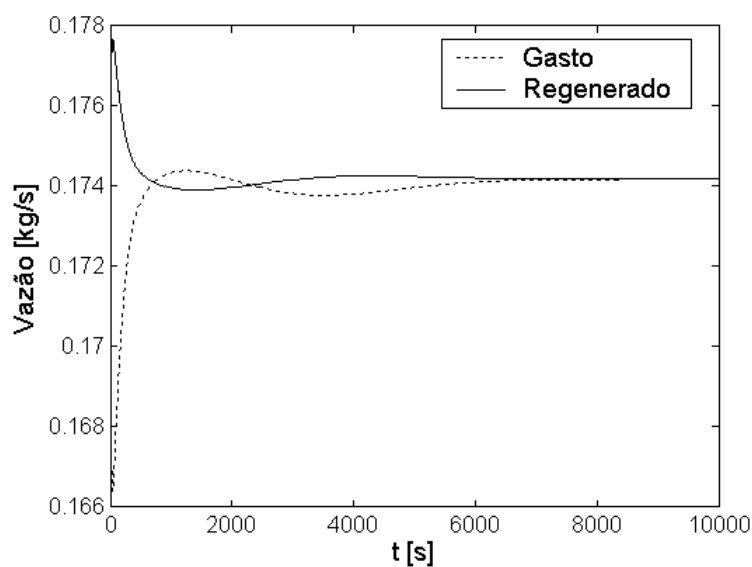


Figura 40 - Vazões de catalisador gasto e regenerado.

Pode-se notar que nos instantes iniciais, a maior pressão ocorre no regenerador, mas tem uma tendência de queda. Por sua vez, a pressão no vaso separador sofre uma pequena variação mas estabiliza rapidamente. Com isso, o diferencial de pressão na TCV diminui, reduzindo a vazão de catalisador regenerado. Contrariamente à linha de catalisador regenerado, a vazão através da linha de catalisador gasto aumenta pelo mesmo motivo, já que o diferencial de pressão no corpo da LCV aumenta. Assim que as pressões no regenerador e no vaso separador estabilizam, e com isso, os diferenciais de pressão nas válvulas, as vazões não se alteram mais.

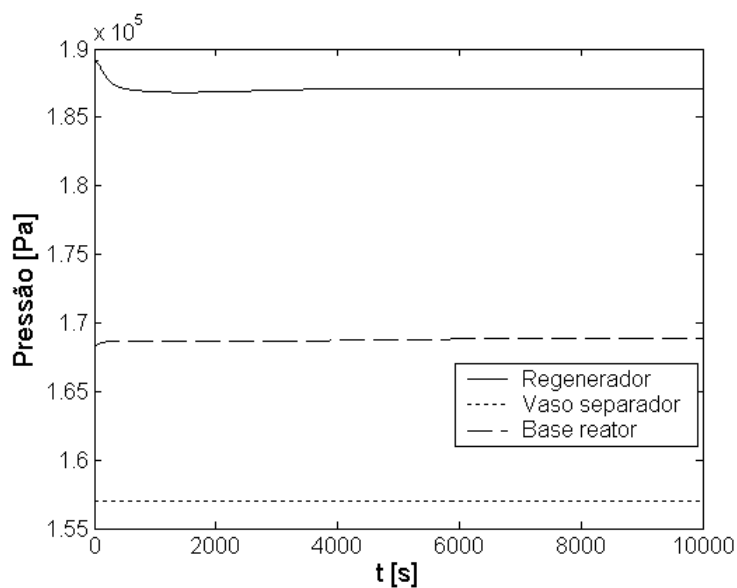


Figura 41 – Pressões no conversor.

A Figura 42 mostra as temperaturas do regenerador, da saída do *riser* e do reator. Estas curvas são o resultado da solução do conjunto das equações da energia, que prevê as reações de combustão, e massa.

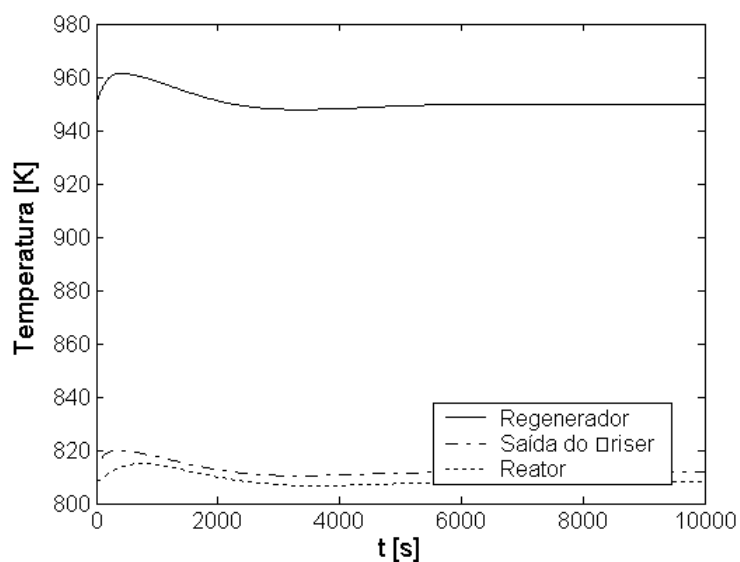


Figura 42 – Temperaturas no conversor.

As temperaturas do catalisador na saída do *riser* são menores que a do regenerador devido aos processos de transferência de energia para a vaporização do gasóleo e para as reações endotérmicas de craqueamento. Estas temperaturas

respondem quase que instantaneamente às variações de temperatura no regenerador, pois o tempo de residência do catalisador no *riser* é bem menor. No reator, as variações de temperatura são causadas principalmente pelos fluxos de catalisador e vapor d'água que cruzam a sua fronteira. Note que a temperatura não se altera de forma imediata, devido a maior inércia térmica decorrente da quantidade de catalisador existente no equipamento.

A Figura 43 mostra a evolução da composição dos gases (CO , CO_2 e O_2) na região densa do regenerador, resultantes dos processos de combustão do coque e de oxidação de CO . Pode-se notar nesta figura e na Figura 42 que, uma redução da fração de CO caracteriza a evolução para um processo de combustão total, refletido no aumento da temperatura do regenerador. À medida que se aumenta o excesso de O_2 , chega-se num limite em que as reações de oxidação de CO não se processam com a mesma intensidade e a temperatura do regenerador chega a um máximo. A quantidade extra de ar agora é demais para a quantidade de coque presente, provocando o resfriamento do leito. Com isso, a fração de CO aumenta e a temperatura do regenerador diminui.

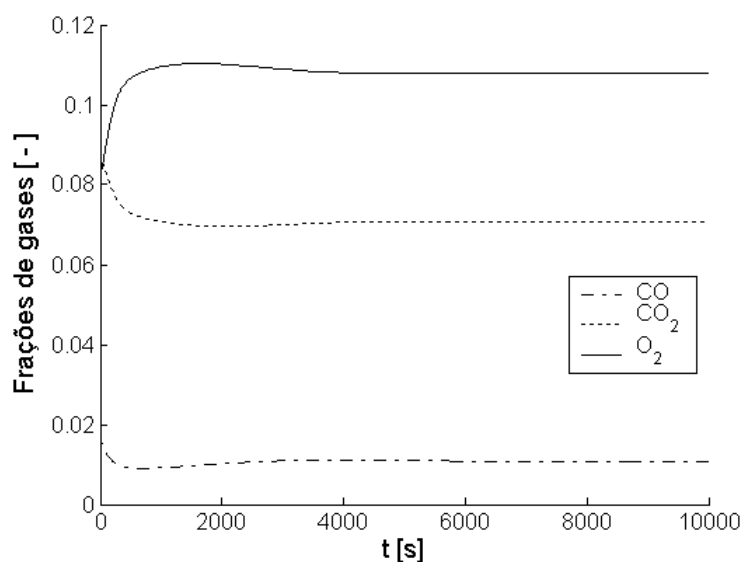


Figura 43 – Frações de gases no regenerador.

A Figura 44 mostra as variações dos teores de coque nos catalisadores regenerado e gasto. O teor de coque no catalisador regenerado depende fortemente

da temperatura, do teor de coque e da vazão de catalisador gasto, combinado com a vazão de ar de alimentação do regenerador que é constante.

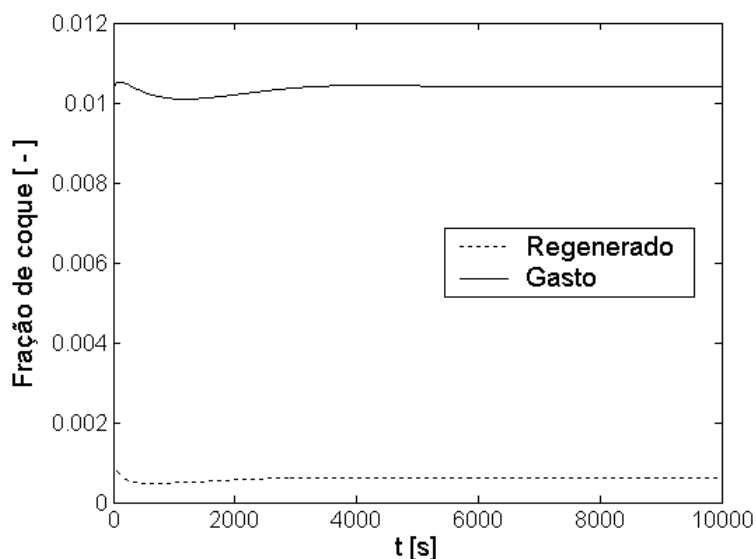


Figura 44 – Frações de coque nos catalisadores gasto e regenerado.

Observa-se que o processo de combustão no leito é mais efetivo nos instantes iniciais, correspondendo com o aumento da temperatura e com uma redução da fração de CO. A vazão de catalisador é suficiente para suprir de coque as reações de combustão, de forma a manter a tendência de aumento da temperatura. Desta forma, observa-se uma redução no teor de coque do catalisador regenerado. Com o aumento da vazão de catalisador gasto, a quantidade de catalisador altera de forma significativa o balanço de energia e a relação coque/ar fazendo com que a fração de CO aumente. O processo de combustão se afasta da condição de queima total e o teor de coque no catalisador regenerado volta a aumentar.

O comportamento do teor de coque no catalisador gasto depende basicamente da temperatura do catalisador regenerado e do tempo de residência deste no *riser*. Nos instantes iniciais, o aumento da temperatura do regenerador compensa a redução da vazão de catalisador através do *riser* e o teor de coque no catalisador gasto sofre um pequeno aumento. Com a temperatura do regenerador chegando ao máximo, para uma menor vazão de catalisador regenerado, a influência de um menor tempo de residência no *riser* se sobrepõe à influência da temperatura na

geração de coque. Com tudo isso, aliado ao baixo teor de coque no catalisador regenerado, provoca uma alteração no balanço de coque no vaso separador. Esta alteração não é sentida imediatamente, devido à massa de catalisador existente no local. Quando a variação na vazão de catalisador regenerado já não é tão significativa, o comportamento do teor de coque no catalisador gasto passa a depender basicamente do teor de coque no catalisador regenerado.

A Figura 45 mostra a variação na relação entre a quantidade de coque e de ar de alimentação que são admitidos no regenerador durante o processo transiente. Esta é a variável que serviu de referência para avaliar se a condição de regime estacionário foi atingida por ocasião das simulações. Isto porque, dentre as outras variáveis, esta foi a última a se estabilizar. Como a taxa de queima no regenerador pode variar em função da vazão de catalisador e/ou do teor de coque, se esta relação não for constante, isto significa que ainda persiste do desequilíbrio geral do conversor.

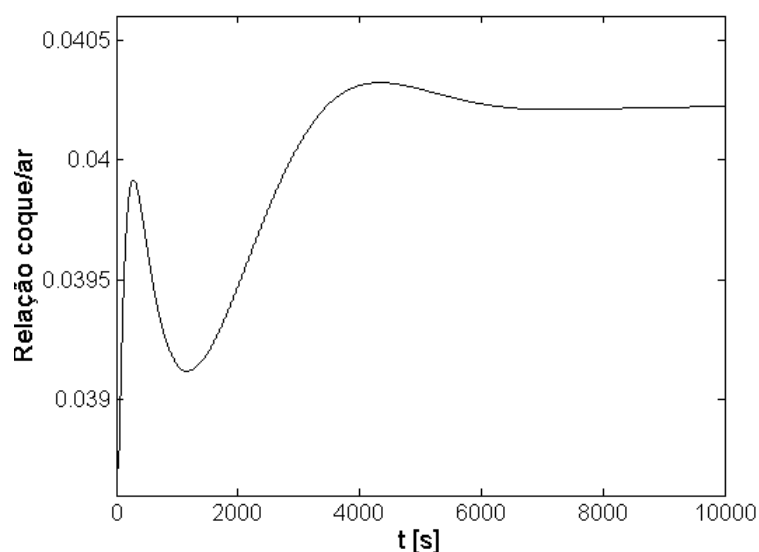


Figura 45 – Relação coque/ar na entrada do regenerador.

6.2.2 VERIFICAÇÃO DO MODELO DE CONTROLE

A fim de verificar a atuação do controle, foram simulados três casos correspondentes à aplicação de distúrbios nas seguintes variáveis controladas do conversor:

- Caso 1: Pressão no topo do reator;
- Caso 2: Temperatura na saída do *riser* e nível do reator;
- Caso 3: Diferencial de pressão entre o regenerador e o reator;

Estes distúrbios foram escolhidos por serem variáveis operacionais possíveis de serem controladas. Em todos os casos citados, aplica-se o controle de nível no reator, procedimento de segurança importante na operação normal da planta real. Os degraus são aplicados, variando-se os valores da pressão no reator e o diferencial de pressão em 5%. No terceiro caso, reduz-se a temperatura na saída do *riser* até 810 K. A simulação se inicia a partir da condição de estado estacionário, atingida na simulação do item 5.2.3 e o controle atua a cada vinte intervalos de tempo, ou seja, a cada 2,8 s, para um passo de tempo de 0,2 s. Logo que o sistema consegue ajustar a variável controlada, a simulação é interrompida.

6.2.3 CASO 1: DEGRAU NA PRESSÃO NO TOPO DO REATOR

Um aumento de 5 % no valor da pressão do reator (variável controlada) provoca uma ação de controle que tende a reduzir rapidamente a vazão de gás pela válvula FV, como mostrado na Figura 46. A variação da vazão é consequência do grau de abertura da válvula FV, (vide Figura 3) que é a variável manipulada.

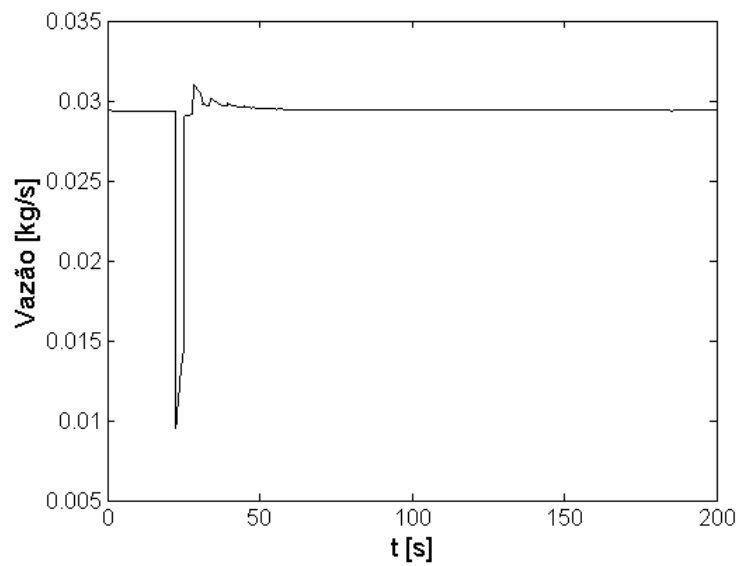


Figura 46 - Comportamento da abertura da válvula FV para o caso 1.

Como se pode observar, o controle reage de forma mais intensa pois o sinal gerado é função da parcela proporcional do erro da equação de controle.

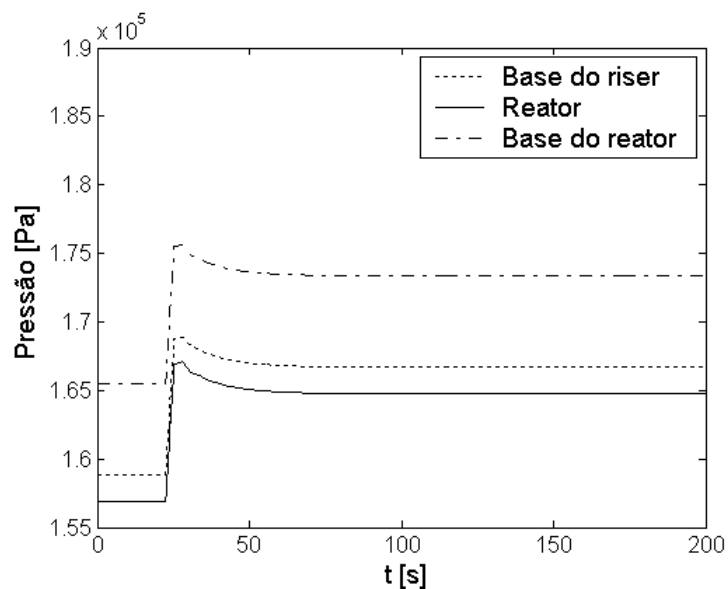


Figura 47 - Comportamento das pressões para o caso 1.

Neste instante, a pressão no reator, (Figura 47), começa a aumentar até que um novo sinal de controle seja enviado à válvula. Como a pressão já está mais

próxima do valor ajustado, este sinal já se torna bem menor que o primeiro e a vazão através da FV varia em menor intensidade. O processo prossegue então, até que o valor do diferencial de pressão, ou da pressão no regenerador seja alcançado.

6.2.4 CASO 2: DEGRAU NA TEMPERATURA NA SAÍDA DO RISER

Esta simulação corresponde à aplicação de um degrau no valor da temperatura de saída do *riser*, nas mesmas condições citadas anteriormente. No instante inicial um sinal de erro é gerado, amplificado e transmitido para a variável manipulada, que é o fechamento da válvula TCV.

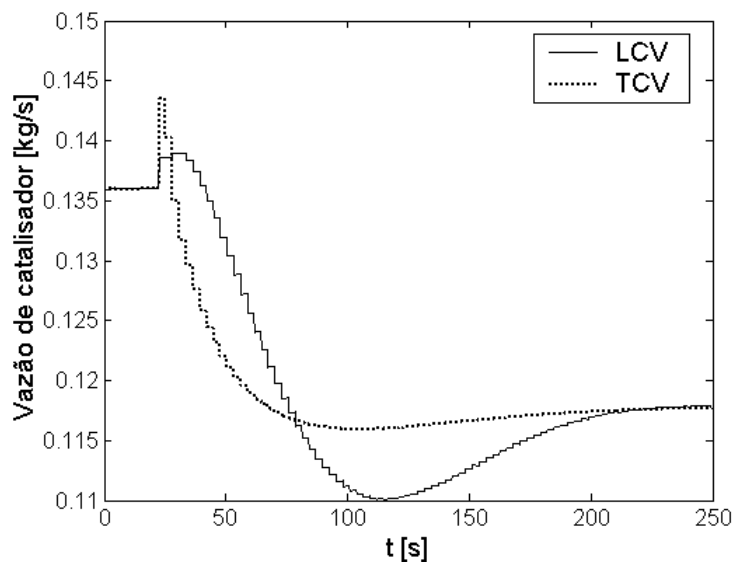


Figura 48 - Vazões de catalisador pelas válvulas TCV e LCV para o caso 2.

Em consequência do desequilíbrio de massa de catalisador no reator, o controle de nível atua de forma a absorver este distúrbio, manipulando a abertura da válvula LCV, até que o valor original seja restabelecido, como mostra a Figura 49.

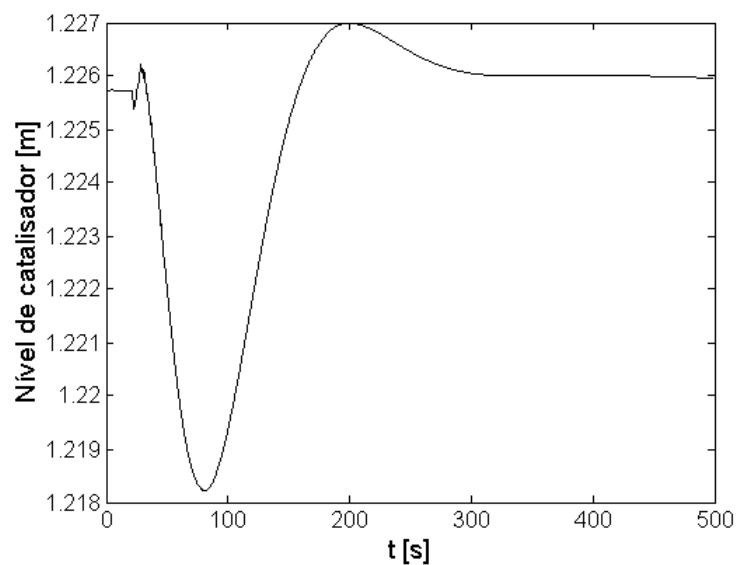
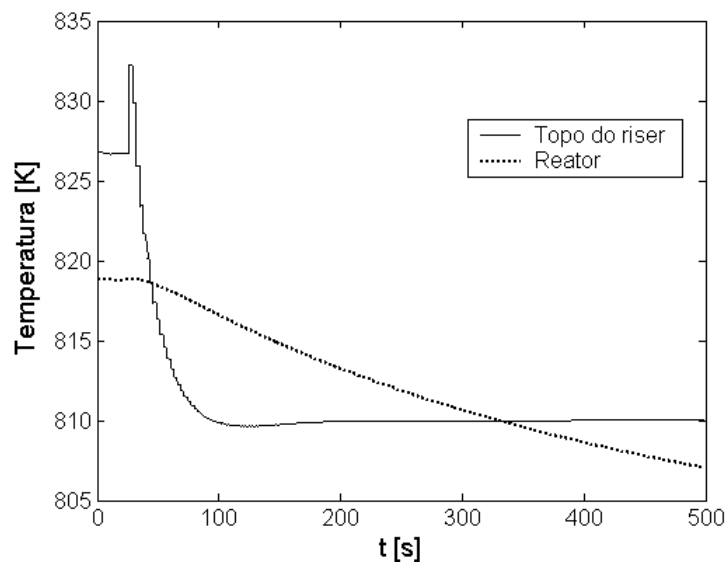


Figura 49 – Comportamento do nível do reator para o caso 2.

Com a diminuição da vazão de catalisador, altera-se o balanço de energia no *riser*, provocando queda na temperatura de saída, cujo comportamento está ilustrado através da Figura 50.

Figura 50 - Temperatura no topo do *riser* para o caso 2.

A temperatura do reator, que depende da temperatura de saída do *riser* entretanto, responde de uma forma mais lenta, como já mostrado no item 6.2.1. A tendência é que seu valor estabilize num patamar inferior ao da temperatura de entrada de catalisador, já que o balanço de energia no reator considera a vazão de vapor de *stripping*, que se encontra a uma temperatura inferior ao do catalisador, e não considera as perdas para o meio ambiente, portanto adiabático.

6.2.5 CASO 3: DEGRAU NO DIFERENCIAL DE PRESSÃO ENTRE O REGENERADOR E O REATOR

Durante a aplicação do degrau no diferencial de pressão, a pressão e o nível do reator são controlados. Para atingir o novo valor ajustado, o controle atua na abertura da válvula de gás GV, (vide Figura 3), alterando o valor da pressão no regenerador. A vazão através da válvula GV varia conforme mostrado na Figura 51. Como a variação de pressão no regenerador desequilibra as pressões na planta, o controle atua com o fim de manter o valor ajustado para a pressão no reator, regulando a vazão de gás através da válvula FV. Assim como para a válvula GV, seu comportamento está ilustrado na Figura 51.

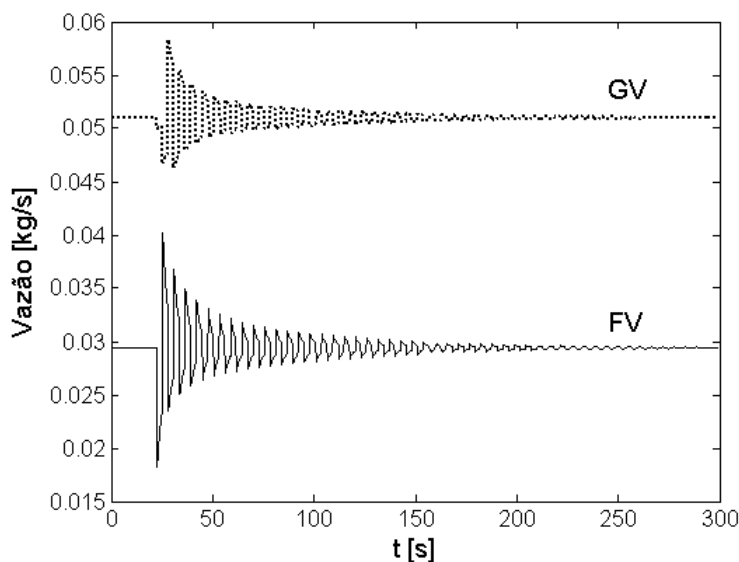


Figura 51 - Vazões de gás pelas válvulas FV e GV para o caso 3.

Em consequência da atuação do controle, que mantém a pressão no reator e altera a pressão no regenerador, o diferencial de pressão estabiliza então, no valor desejado, correspondente a 5% do valor original, como mostra a Figura 52.

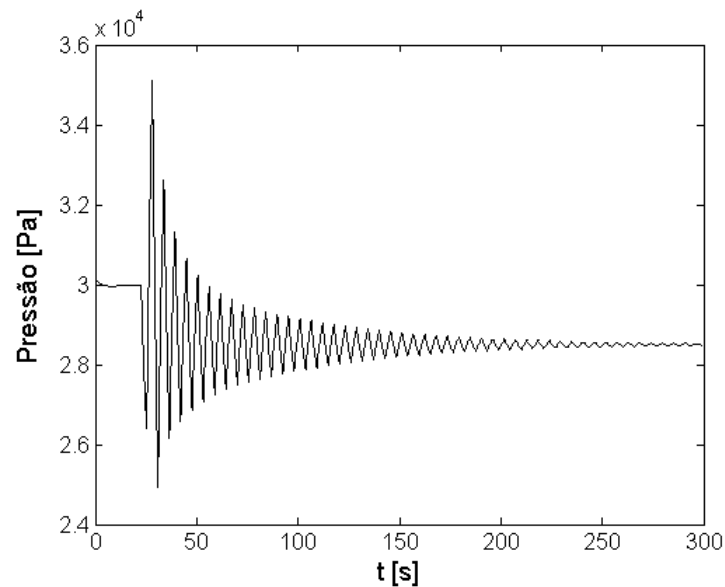


Figura 52 - Diferencial de pressão entre o regenerador e o reator.

As oscilações presentes nas Figuras 51 e 52, quando da aplicação do degrau, são consequências do comportamento discreto do controle. Nesta simulação, o algoritmo atua a cada vinte passos de tempo, mas caso a atuação seja mais freqüente, a tendência é de que elas diminuam ou desapareçam. Como um dos objetivos deste trabalho é a verificação do comportamento dinâmico do modelo e suas potencialidades para controle, nenhuma análise foi feita quanto à qualidade de atuação do algoritmo de controle.

7 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

“Aquilo que sabemos é pouco;

o que não sabemos é imenso.”

Pierre-Simon de Laplace,

Um modelo dinâmico de um conversor de craqueamento catalítico fluidizado foi desenvolvido, com ênfase no estudo do escoamento gás-sólido, unidimensional e estacionário do *riser* e na forma de resolução das suas equações. As equações de conservação da quantidade de movimento, energia e da massa são utilizadas para obter equações diferenciais ordinárias, integradas pelo método das diferenças finitas utilizando aproximação implícita. Procedimentos são adotados para correção das pressões na base do *riser* e na região de escoamento, condicionados à equação da conservação da massa. Uma análise de sensibilidade em relação aos critérios de convergência e à diminuição da malha é conduzida para obter maior fidelidade dos resultados.

O modelo do conversor é o resultado da união do modelo do *riser*, reator e regenerador. Pelo fato do tempo de permanência do catalisador no *riser* ser muito menor que nos outros equipamentos, seu comportamento é assumido como quase-estático. O reator é modelado como CSTR e o regenerador é composto de uma região densa com duas fases. As equações são resolvidas pelo método de Runge-Kutta de quarta ordem. Um procedimento de atraso de transporte é aplicado às variáveis de saída do *riser* para compensar a diferença entre o tempo de residência e o passo de tempo de integração das equações.

São feitas simulações considerando duas condições iniciais de temperatura para o regenerador. Resultados apresentando a evolução da pressão e da temperatura do regenerador e temperatura no reator mostram a independência da solução em relação ao estado inicial. Uma análise de sensibilidade é feita levando-se em conta a magnitude do passo de tempo.

As potencialidades do modelo do *riser* são exploradas através de mudanças na temperatura de entrada do catalisador e na quantidade de coque da carga de alimentação. Foi verificada a sensibilidade das temperaturas do catalisador e do gás,

da conversão e do teor de coque na saída do *riser* para várias razões entre catalisador e gasóleo.

As potencialidades do modelo do conversor são exploradas através de simulações que utilizam um algoritmo de controle Proporcional e Integral para alterar condições de operação da planta. Resultados em regime estacionário são apresentados e comparados com os de uma planta piloto da PETROBRAS. Respostas dinâmicas são analisadas através da aplicação de três distúrbios em variáveis controladas, mantendo o nível de catalisador constante pela atuação do modelo de controle.

7.1 CONCLUSÕES

Os resultados do modelo apresentado são coerentes com os fenômenos físicos que ocorrem num conversor de craqueamento catalítico.

A definição de uma malha espacial não uniforme para o *riser* é primordial para captar os gradientes na entrada e para a definição do tempo de processamento. Além disso, o método de Runge Kutta de quarta ordem, por ser explícito, limita o valor do passo de tempo utilizado.

O método iterativo de solução das equações do *riser* depende do sucesso do acoplamento entre as equações de conservação da quantidade de movimento e da massa com a equação da conservação da energia. O processo de convergência mostra-se muito sensível a este acoplamento.

O modelo, altamente não linear, demonstra ter potencial para ser utilizado por um algoritmo de controle multi-variável, já que respondeu de forma coerente aos distúrbios provocados nas três simulações apresentadas.

7.2 RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Baseado nas diversas atividades de pesquisa, análise numérica e de verificação dos resultados realizados durante a elaboração deste trabalho, pôde-se levantar algumas atividades que podem contribuir para o aprimoramento do modelo:

- ✓ Implementação de uma malha espacial adaptativa para o modelo do *riser*;
- ✓ Mudança do modelo cinético do *riser* dos atuais quatro *lumps* para outro, cujas constantes cinéticas independem do tipo de carga utilizada;
- ✓ Substituição do modelo do regenerador por outro que contemple a fase diluída e que utilize um método numérico que não restrinja o passo de tempo utilizado pelo modelo do conversor;
- ✓ Comparação dos resultados do modelo dinâmico com dados experimentais;
- ✓ Substituição do algoritmo de controle Proporcional-Integral por um Preditivo;
- ✓ Aplicação de outros métodos numéricos para solução das equações do *riser*;
- ✓ Realização de uma análise mais precisa sobre o modelo da região de vaporização do *riser*.
- ✓ Pesquisar e testar outros algoritmos para se avaliar a pressão ao longo do *riser*.

REFERÊNCIAS

ABADIE, E., **Craqueamento Catalítico**, Relatório SEREC/CEN-SUD, RJ, 1997.

ALI, H., ROHANI, S., **Dynamic Modeling and Simulation of a Riser-Type Fluid Catalytic Cracking Unit**, Chem. Eng. Technology, v. 20, 118-130, 1997.

ARANDES, J. M. et al., **Modelling FCC Units Under Steady and Unsteady State Conditions**, The Canadian Journal of Chemical Engineering, february, 2000, v. 78.

ARBEL, A. et al., **Dynamic and Control of Fluidized Catalytic Crackers. Modeling of the Current Generation of FCC's**, Ind. Eng. Chem. Res., v. 34, 1228-1243, 1995.

DING, J., GIDASPOW, D., **A Bubbling Fluidization Model Using Kinetic Theory of Granular Flow**, AIChE Journal, v. 36, 4, 1990.

ELLIS, R. C., RIGGS, J. B., **Modeling and Optimization of a Model IV Fluidized Catalytic Cracking Unit**, AIChE Journal, v. 44, 9, 2068 – 2079, 1998.

HAIDER, A., LEVENSPIEL, O., **Drag Coefficient and Terminal Velocity of Spherical and Nonspherical Particles**, Powder Technology, v. 58, 63-70, 1989.

HAN, I. -S., CHUNG, C. -B., **Dynamic Modeling and Simulation of a Fluidized Catalytic Cracking Process. Part I: Process modeling**, Chemical Engineering Science, v. 56, 1951-1971, 2000.

HAN, I. -S., CHUNG, C. -B., **Dynamic Modeling and Simulation of a Fluidized Catalytic Cracking Process. Part II: Property estimation and simulation**, Chemical Engineering Science, v. 56, 1973-1990, 2001.

JACOB, S. M. et al., **A Lumping and Reaction Scheme for Catalytic Cracking**, AIChE Journal, v. 22, 4, 701 –713, 1976.

JUAREZ, J. A. et al., **A Strategy for Kinetic Parameter Estimation in the Fluid Catalytic Cracking Process**, Ind. Eng. Chem. Res., v. 36, 12, 5170-5174, 1997.

KUNII, D., LEVENSPIEL, O., **Circulating Fluidized-bed Reactors**, Chemical Engineering Science, v. 52, 15, 2471-2482, 1997.

LANSARIN, M. A., **Modelagem e Simulação da Seção de Conversão de uma Unidade FCC**, 1997, 147 f., Tese de Doutorado em Engenharia Química, UNICAMP, Faculdade de Engenharia Química, Campinas-SP.

LEE, L. S., CHEN, Y. W., HUANG, T. N., **Four-Lump Kinetic Model for Fluid Catalytic Cracking Process**, The Canadian Journal of Chemical Engineering, v. 67, 1989.

MALAY, P., MILNE, B. J., ROHANI, S., **The Modified Dynamic of a Riser Type Fluid Catalytic Unit**, The Canadian Journal of Chemical Engineering, v. 77, february, 1999.

MARTIGNONI, W. P., **Desenvolvimento de Modelagem e Simulação de risers de FCC Modelo 1-D**, Relatório PETROBRAS, 2000.

MAYA, R., BOGLE, D., LÓPEZ, F., **Approach to the Analysis of the Dynamics of Industrial FCC Units**, J. Proc. Cont. v. 8, 2, p. 89-100, 1998.

Mc FARLANE, R. C. et al., **Dynamic Simulator for a Model IV Fluid Catalytic Cracking Unit**, 1990, 75 f. AIChE, Annual Meeting, Chicago, Illinois.

MELO, R. F., **Modelagem Dinâmica de Vaso Separador e Stripper de uma Unidade de FCC**, Dissertação de Mestrado em Engenharia Mecânica e Materiais, Departamento de Pesquisa de Pós-Graduação, CEFET, Curitiba-PR (a ser publicado).

OGATA, K., **Engenharia de Controle Moderno**, 2ª edição, Rio de Janeiro – RJ, Editora Prentice Hall do Brasil, LTDA., 1993, 781 p.

PATANKAR, S. V., **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**, Second Edition, USA, Taylor & Francis Editions., 1980, 197 p.

PENTEADO, J. C., **Modelagem Dinâmica do Regenerador de uma Unidade de Craqueamento Catalítico**, 2003, 68 f., Dissertação de Mestrado em Engenharia

Mecânica e de Materiais, Departamento de Pesquisa de Pós-Graduação , CEFET-PR, Curitiba-PR.

REID, R. C., **The Properties of Gases & Liquids**, Fourth Edition, Singapore, McGraw-Hill International Editions, 1987, 741 p.

SANTOS, M., **Modelo Dinâmico para o Controle do Conversor de uma Unidade de FCC UOP STACKED**, 2000, 138 f. Dissertação de Mestrado em Engenharia Química, Departamento de Engenharia Química, UFRGS, Porto Alegre-RS.

THE NORTH AMERICAN CATALYSIS SOCIETY (NACS), **Eger Murphree and The Four Horsemen: FCC, FLuid Catalytic Cracking**. Disponível em <http://www.nacatsoc.org/history.asp?HistoryID=8>. Acesso em: 12 fevereiro 2003.

THEOLOGOS, K. N., MARKATOS, N. C., **Advanced Modeling of Fluid Catalytic Cracking riser-Type Reactors**, AIChE Journal, v. 39, 6, 1007-1017, 1993.

TSUO, Y. P., GIDASPOW, D., **Computation of Flow Patterns in Circulating Fluidized Beds**, AIChE Journal, v. 36, 6, 885-896, 1990.

YANG, W., **Correlation for Solid Factor in Vertical Pneumatic Conveying Lines**, AIChE Journal, v. 24, 3, 548 - 552, 1978.

ZHENG, Y.-Y., **Dynamic Modeling and Simulation of a Catalytic Cracking Unit**, Computers Chem. Eng., v. 18, 1, 39-44, 1994.

APÊNDICE A – BREVE HISTÓRICO DO CRAQUEAMENTO

Alguns marcos na evolução tecnológica dos conversores contribuíram para escrever a história dos processos de craqueamento. Dentre eles, pode-se citar a aplicação do craqueamento térmico e o advento das teorias sobre o craqueamento catalítico (1915), os estudos sobre a regeneração (1927), o surgimento dos catalisadores particulados e o conhecimento sobre fluidização (1938) e a aplicação dos catalisadores zeolíticos (1963).

Até 1913 toda a gasolina era produzida da destilação direta do petróleo, o que acarretava a variação de rendimentos, qualidade e quantidade. Na tentativa de otimizar a produção, surgiu a partir de 1915 o craqueamento térmico, que consiste numa reação química utilizando mecanismos via radicais livres. Este processo foi amplamente utilizado até 1943, quando a metade da gasolina consumida nos Estados Unidos era produzida por craqueamento térmico. O processo era bastante severo, sujeito a um forte aquecimento (450°C a 600°C) e altas pressões (20 a 60 atm), conforme o tipo de carga. O resíduo resultante das reações (coque) ficava incrustado nas paredes internas dos equipamentos e tinha que ser retirado periodicamente, exigindo paradas freqüentes das unidades. Os equipamentos necessitavam ser robustos e eram caros, além de ficarem inativos por longos períodos. Com o desenvolvimento da indústria automobilística, surgiu a necessidade de intensificar a produção de gasolina. A partir de então, começaram a surgir os processos catalíticos de craqueamento que proporcionavam octanagens (medida para avaliar a resistência à detonação) superiores ao da gasolina produzida pelo processo térmico. Devido a estes fatores, aquele processo foi se tornando obsoleto. Por volta de 1915, estudou-se a ação catalítica de argilas a alta temperatura, em frações pesadas de petróleo. O processo possibilitava a obtenção de hidrocarbonetos leves e médios em condições muito mais brandas que no craqueamento térmico. Entretanto, observou-se que um resíduo carbônico, formado em consequência das reações, se depositava na superfície do catalisador, isolando-o do contato com a carga e portanto desativando-o. Pensando nisso, Eugéne Houdry, a partir de 1927, começou a estudar uma forma de eliminar o depósito de resíduo, chamado de coque, através da sua queima controlada. Ele concluiu que o

mecanismo de deposição e a sua atividade eram função do tempo de contato entre a carga e o catalisador. A *Houdry Process Corporation* patenteou o primeiro processo comercial de craqueamento catalítico em leito fixo que era composto por três reatores. O processo consistia da armazenagem em leito fixo do catalisador que era colocado em contato com a carga após um aquecimento inicial. Desta forma, a cada intervalo de aproximadamente 10 minutos, o reator era parado, purgado com vapor e o depósito de coque era queimado através da circulação de ar. Em seguida, era lavado com vapor antes de entrar novamente em contato com a carga. Este processo era intermitente, com etapas de desativação de poucos minutos e de regeneração que levava um tempo maior.

A partir dos trabalhos de Houdry e com o objetivo de tornar o processo contínuo, foram construídas unidades de craqueamento em leito móvel com transporte mecânico do catalisador, cujas partículas eram maiores e mais pesadas. Como ilustrado na Figura 53, o conversor era composto basicamente de um reator, um regenerador, um silo e um conjunto de elevadores.

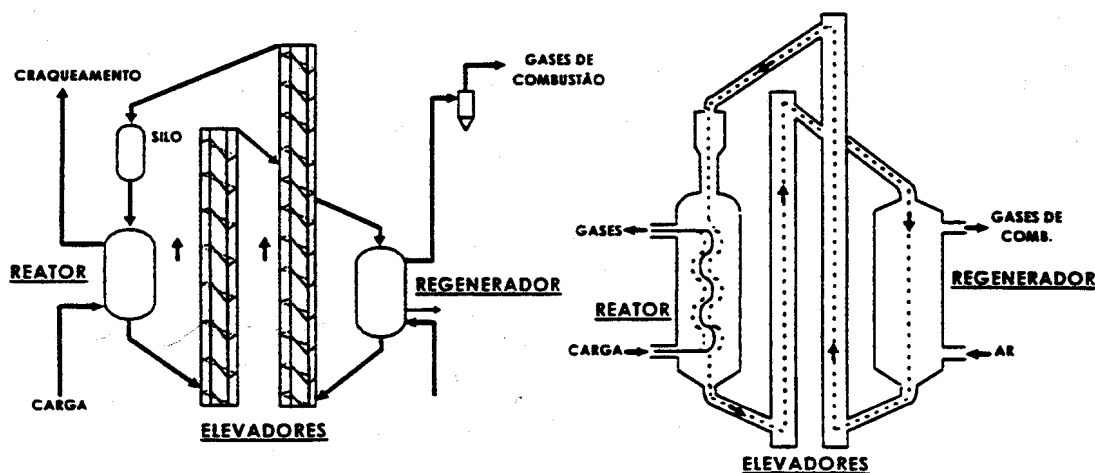


Figura 53 - Esquema do conversor Houdry (Abadie, 1997).

A carga era colocada em contato com o catalisador na forma gráuda que se deslocava no reator por gravidade, promovendo as reações de craqueamento e produzindo os gases que eram retirados no topo do equipamento. Em seguida, ainda por gravidade, o catalisador se dirigia à base do transportador helicoidal que

se encarregava de transportá-lo até o topo do regenerador. No regenerador, o coque era queimado, o catalisador saía pela parte inferior com um teor de impurezas menor e os gases de combustão pelo topo, através de um separador tipo ciclone. Deste ponto, era transportado novamente para o topo do silo e daí de volta ao reator. No entanto, existiam alguns problemas, como a abrasão das hélices espiraladas responsáveis pela circulação do catalisador, obrigando a unidade a freqüentes paradas. Além disso, havia a necessidade de grandes elevações, já que o catalisador entrava em contato com a carga por gravidade. Devido a estes fatores e com o surgimento do transporte pneumático, desenvolvido pela Socony Mobil em 1951, o processo foi se tornando obsoleto.

Deste tipo de conversor para os atuais, muitas alterações foram feitas em decorrência da evolução do processo, mas as etapas do ciclo básico de craqueamento se mantiveram: craqueamento, separação de produtos, transporte de catalisador e regeneração. As grandes modificações surgiram com o objetivo de reduzir o tamanho dos equipamentos, simplificar as tubulações de transporte de catalisador e gases, facilitar a operação das plantas e aumentar a segurança e a garantia da maior eficiência do processo em si.

A partir de 1938, a Esso começou a estudar o comportamento do catalisador de craqueamento sob a forma moída. Com os fundamentos da fluidização já em andamento, as atividades de pesquisa culminaram com o surgimento do craqueamento fluido. Apareceram então, as unidades conversoras com leito fluidizado, financiadas pelo governo americano, incentivadas pelo advento da segunda guerra mundial. A Esso lançou nesta época três modelos de conversores. Seguindo as necessidades tecnológicas, a linha culminou com o lançamento do modelo IV, ilustrado na Figura 54, cujas unidades eram mais compactas, baratas e eficientes que as anteriores.

O controle da circulação era feito através da injeção de vapor d'água em pontos estratégicos das linhas de catalisador gasto e regenerado, o que provocou a diminuição da altura dos conversores em relação aos outros modelos. As reações de craqueamento, iniciadas no *riser*, eram completadas na fase densa do reator e o modelo operava com catalisadores de baixo e alto teor de alumina. Com o aparecimento de catalisadores zeolíticos, permitiu-se que as reações acontecessem com uma velocidade muito maior, reduzindo assim o tempo de contato necessário entre catalisador e carga, e por consequência, o tempo de residência nos reatores. Com isso, a existência da fase densa com craqueamento nos reatores se tornou impraticável e as reações passaram a ocorrer exclusivamente em um tubo vertical, denominado *riser*. Foi neste momento que a denominação "reator" se tornou

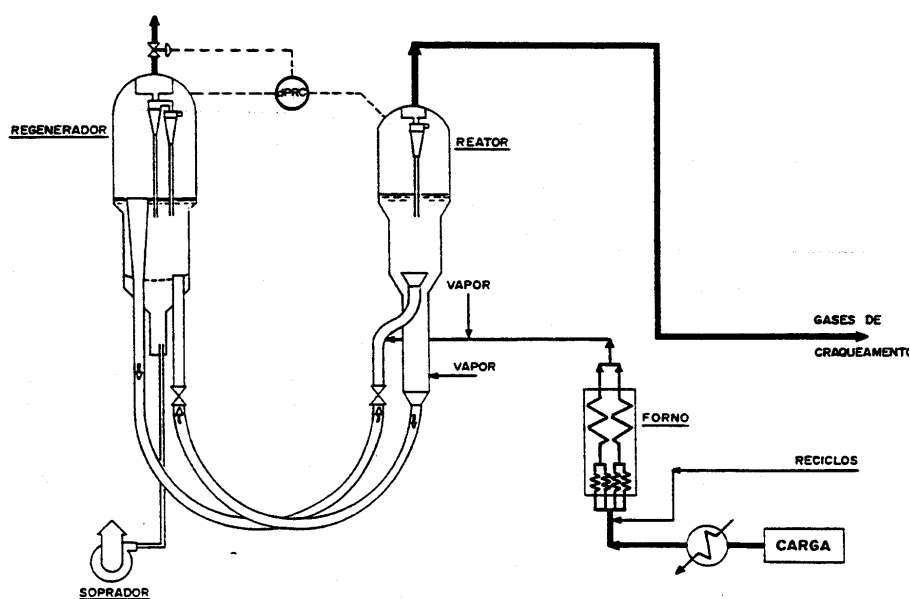


Figura 54 - Esquema do conversor Esso, Modelo IV (Abadie, 1997).

imprópria, já que a maior parcela das reações passaram a ocorrer no *riser*. O modelo IV foi então sofrendo modificações para operar com o novo tipo de catalisador, como mostrado na Figura 55.

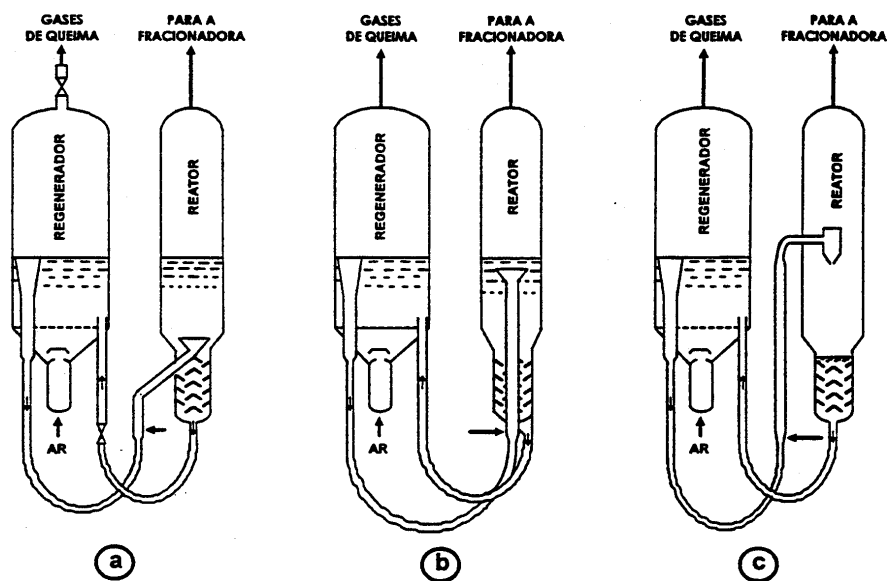


Figura 55 - Esquema da evolução do conversor Esso, Modelo IV (Abadie, 1997).

Novos projetos passaram a ser desenvolvidos em função do novo catalisador com a finalidade de aproveitar as suas vantagens, como o '*flexicracking transfer line*'

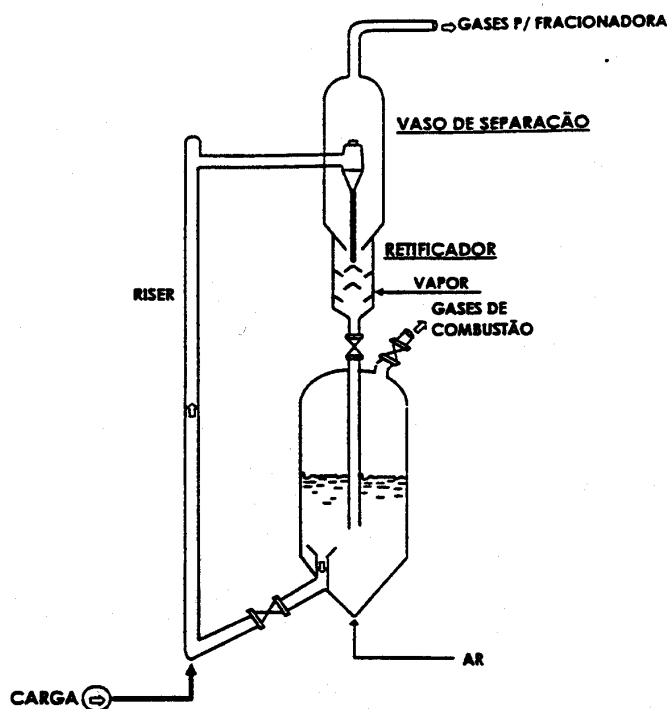


Figura 56 - Esquema do conversor flexicracking transfer line (Abadie, 1997).

ilustrado na Figura 56.

Neste modelo, as reações ocorrem exclusivamente no *riser*, em um curto intervalo de tempo, e a mistura é descarregada em ciclones no interior de um vaso separador (antigo reator), onde a reação é interrompida. Em seguida, o catalisador retorna ao regenerador por gravidade.

Mais tarde, a EXXON (Esso) chegou a apresentar novas alternativas. A UOP desenvolveu modelos próprios, dentre eles, um bastante compacto conhecido como *Stacked*, que começou a operar em 1947 na refinaria de Detroit. Sua característica construtiva consistia na colocação do reator sobreposto ao regenerador, formando uma única estrutura e cujas vantagens tornaram-no muito procurado. Em consequência de pesquisas desenvolvidas sobre as reações de craqueamento, regeneração mais efetiva e rápida do catalisador, redução de catalisador residual circulante, menores dimensões e queima estável no regenerador, os modelos foram se transformando a fim de propiciar uma produção mais eficiente. A Kellogg, em parceria com a SHELL, desenvolveu um novo tipo de conversor com custo menor, seguindo os passos da UOP. Em 1950, lançou o modelo Orthoflow A, de concepção muito arrojada para a época, cujas características principais eram a sua forma compacta com tubulações internas, eliminando juntas de expansão e a presença de válvulas *plugs* em substituição às *slide valves*. Depois disto, vieram ainda os modelos B e C, este último incorporando modificações posteriores para aproveitar as vantagens advindas do surgimento dos catalisadores zeolíticos em 1963. Em 1972, surge o conversor *Orthoflow F*. Uma de suas unidades começou a operar em 1978 na Refinaria Presidente Getúlio Vargas (REPAR) da PETROBRAS, com uma capacidade de 41000 barris diários e outra na Refinaria Henrique Lage (REVAP), também da PETROBRAS, para 57000 barris diários, em 1981. Ainda em 1978, a M.W. Kellogg, associada à Amoco Oil Company, lançou uma versão modificada do modelo F, mostrado na Figura 57. Chamado de Ultra-Orthoflow Catalytic Cracking, incorporando a tecnologia de combustão completa desenvolvida pela Amoco.

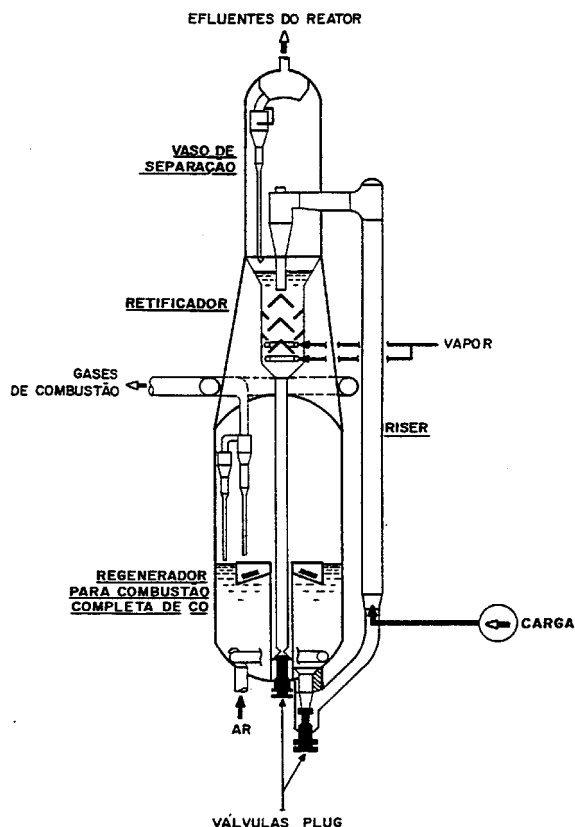


Figura 57 - Esquema do conversor UOP STACKED Ultra-Ortoflow (Abadie, 1997).

Nota-se, comparando o equipamento da Figura 53 com o da Figura 57, que a evolução foi intensa. Pesados investimentos continuam a ser feitos no setor, por ser um processo altamente lucrativo, uma vez que transforma frações residuais de baixo valor em produtos nobres com valor comercial e, por se adaptar às demandas do mercado consumidor local, devido à sua ampla flexibilidade operacional. (Abadie, 1997).

ANEXO A – DADOS CINÉTICOS

Tabela 9 - Dados cinéticos do modelo do *riser* (Han e Chung (2000)).

	Constantes pré-exponenciais	Energias de ativação	Calor de reação
	1/s	kJ/k _{mol}	kJ/kg
go-gl	1457,50	57359	195
go-gc	127,59	52754	670
go-cq	1,98	31820	745
gl-gc	256,81	65733	530
gl-cq	6,29E-4	66570	690

Tabela 10 - Dados cinéticos da desativação do catalisador (Han e Chung (2000)).

α_{c0} (1/s)	α_{c0}^*	E_c
	kJ/kg	kJ/k _{mol}
1,1E-5	0,1177	49000

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)