

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

ROSILAINE FURTADO DE MELO

MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE VASO SEPARADOR E STRIPPER DE UNIDADES DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO

CURITIBA DEZEMBRO DE 2003

Livros Grátis

http://www.livrosgratis.com.br

Milhares de livros grátis para download.

ROSILAINE FURTADO DE MELO

MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE VASO SEPARADOR E STRIPPER DE UNIDADES DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO

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

Orientador: Prof. Admilson T. Franco, Dr.

Co-orientador: Prof. Silvio Luiz de Mello Junqueira, Dr.

CURITIBA

DEZEMBRO – 2003

TERMO DE APROVAÇÃO

ROSILAINE FURTADO DE MELO

MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE VASO SEPARADOR E STRIPPER DE UNIDADES DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO

Dissertação de Mestrado aprovada como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica, do Curso 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. Admilson Teixeira Franco, Dr. Departamento de Acadêmico de Mecânica, CEFET-PR.

> Prof. Ricardo Augusto Mazza, Dr. Departamento Acadêmico de , UFPR.

Prof. Cezar Otaviano Ribeiro Negrão, PhD. Departamento de Acadêmico de Mecânica, CEFET-PR.

Prof. Luciano Fernando dos Santos Rossi, Dr. Departamento de Acadêmico de Mecânica, CEFET-PR.

Curitiba, 19 de Dezembro de 2003.

Dedico este trabalho a minha mãe (Sra. Palmira) e a memória de meu pai Armando Furtado de Melo.

AGRADECIMENTOS

A Deus por ter me dado a graça de concluir este trabalho.

Ao meu orientador Prof. Dr. Admilson Teixeira Franco, pelos direcionamentos, incentivo e inestimável colaboração e por estar sempre pronto a auxiliar.

Ao Prof. Dr. Silvio Luiz de Mello Junqueira, meu co-orientador. Ao colega e também Prof. Raul Henrique Erthal, e aos demais integrantes do Laboratório de Ciências Térmicas (LACIT), e a todos os colegas e amigos que colaboraram para a elaboração e conclusão deste trabalho. À minha família, e aos professores, que sempre estiveram presentes.

Agradeço também a 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 de Gás – PRH – ANP/MCT CEFET-PR, pelo apoio financeiro que me permitiu inteira dedicação a este trabalho.

Aos pesquisadores do assunto.

RESUMO

O processo de FCC em uma refinaria consiste em uma unidade que converte destilados pesados em gasolina e destilados médios usando craqueamento catalítico. Neste trabalho é apresentada a modelagem dinâmica detalhada de dois equipamentos específicos de uma unidade de craqueamento catalítico fluidizado (FCC), a do vaso separador e do stripper. O vaso separador tem como função promover a separação entre as partículas do catalisador e os gases provenientes do riser e a do stripper recuperar hidrocarbonetos remanescentes aprisionados no catalisador, através da injeção de vapor. O modelo matemático é baseado nas equações de conservação da massa para o gás e catalisador e da conservação da energia. As equações para a pressão e válvulas são incluídas na modelagem, descrevendo a interação entre o vaso separador e a fracionadora e entre o stripper e o regenerador. O modelo numérico resulta em um conjunto de equações diferenciais ordinárias e algébricas não-lineares e acopladas. Na solução emprega-se dois métodos: o método explícito de Runge-Kutta de quarta ordem e o de Diferenças Finitas associado a uma formualação explícita. A solução do modelo consiste na determinação do comportamento das seguintes variáveis: teor de coque no catalisador gasto na saída do stripper, temperatura, massa de catalisador e de gases, pressão no topo e na base do VSS, massa específica dos gases, fração dos componentes gasosos (gasolina, GLP e gases leves) e a variação do nível de catalisador no stripper. O modelo é validado através de comparação com resultados da literatura e com dados de operação obtidos de uma planta piloto de uma refinaria da SIX – Petrobras, apresentando boa concordância. Ao final do trabalho é apresentado um estudo do comportamento de algumas variáveis de entrada quando sujeitas a uma mudança no seu valor de regime estacionário, a saber, na vazão de gasóleo, na temperatura de entrada e na vazão de catalisador no vaso separador.

Palavras chaves: Modelagem dinâmica, Craqueamento catalítico fluidizado, Separador, *Stripper*.

ABSTRACT

The FCC process in a refinery consists of a unit that converts heavy distillates to gasoline and middle distillates using cracking catalyst (catalytic cracking). In this work is presented a detailed dynamic modeling of two specific equipments of a fluidized catalytic cracking (FCC) unit, namely, the separating vase and the stripper. The separating vase has as function of promoting the separation between particles of the catalysis and the gases from the riser and the stripper is designed to remove a portion of hydrocarbons trapped in the pores of the catalyst in the riser, through the vapor injection. The mathematical model is based on the mass conservation equations for gas and catalyst and also conservation of energy. The equations for the pressure and valves are enclosed in the modeling, which accounts the interaction between the separating vase and the fractionator and between the stripper and the regenerator. The numerical model results in a set of nonlinear and coupled algebraic equations, which are solved by the explicit fourth order Runge-Kutta Method and the Finite Difference Method associated to an explicit formulation. Both methodologies allowed the determination of the behavior of the following variables: coke on catalyst in the exit of stripper, temperature, mass of catalyst and gases, pressure in the top and bottom of the VSS, specific mass of the gases, fraction of the gaseous components (gasoline, GLP and light gases) and the variation of the catalyst level in the stripper. The model validation, carried out through comparison with results of literature and with operation data from the SIX - Petrobras pilot plant refinery, presented good agreement. Finally the behavior of some input parameters, namely, the outflow of gas-oil, the temperature of entrance and the outflow of catalyser in the separating vase, is study by subjecting those parameters to changes in its value in stationary regime.

Keywords: Dynamic modeling, Fluidized catalytic cracking, Separator, Stripper.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 Esquema de um FCC – FCC en Revista (2001).	. 20
Figura 2 Vaso separador com <i>riser</i> interno	. 26
Figura 3 Vaso separador de separação rápida	. 28
Figura 4 Modelos de internos de stripper	. 29
Figura 5 Representação esquemática do modelo	. 39
Figura 6 Esquema do modelo de estudo.	. 41
Figura 7 Fluxograma do algoritmo de solução para o método de Runge- Kutta	. 56
Figura 8 Fluxograma do algoritmo de solução para o método de Diferenças Finitas	. 60
Figura 9 Massa de gás para intervalo de tempo de 6,22 s	. 62
Figura 10 Pressão na base e topo do VSS para intervalo de tempo de 6,22 s.	. 63
Figura 11 Massa de gás para diferentes intervalos de tempo	. 64
Figura 12 Massa de catalisador no VSS utilizando diferentes intervalos de tempo	. 65
Figura 13 Temperatura no VSS utilizando diferentes intervalos de tempo	. 66
Figura 14 Pressão dos gases no topo do VSS utilizando diferentes ∆t	. 67
Figura 15 Massa dos gases no utilizando diferentes Δt	. 68
Figura 16 Massa de catalisador utilizando diferentes ∆t	. 68

Figura	17	Massa de catalisador no VSS7	70
Figura	18	Pressão na base e no topo do VSS7	71
Figura	19	Temperatura no VSS7	72
Figura	20	Vazão de catalisador gasto na saída do <i>stripper</i> 7	73
Figura	21	Pressão dos gases e massa dos gases no VSS – Caso 1	76
Figura	22	Pressão na base e massa de catalisador no VSS – Caso 1	17
Figura	23	Nível de catalisador e temperatura – Caso 1	78
Figura	24	Vazões de saída de gás e catalisador gasto no VSS – Caso 1 7	79
Figura	25	Massa de gás e pressão na base do VSS – Caso 2	30
Figura	26	Massa de catalisador e pressão no topo – Caso 2	30
Figura	27	Nível de catalisador e temperatura – Caso 2	31
Figura	28	Pressão na base e massa de gás no VSS – Caso 3	32
Figura	29	Pressão no topo e massa de catalisador – Caso 3	33
Figura	30	Temperatura e nível de catalisador no VSS – Caso 3	34
Figura	31	Vazões de saída do gás e catalisador gasto – Caso 3	34

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 Resumo dos modelos mais relevantes encontrados na literatura.	Erro! Indicad
Tabela 2 Propriedades e coeficientes da equação da conservação da	
energia	57
Tabela 3 Propriedades e coeficientes das equações de Conservação da	
Massa	58
Tabela 4 Dados para simulação – SIX/Petrobras	61
Tabela 5 Dados para simulação – Han <i>et al.</i> (2001)	69
Tabela 6 Comparação do modelo com dados do modelo de Han <i>et al</i> .	
(2001)	74
Tabela 7 Comparação do modelo com dados da SIX/Petrobras.	75

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CST	Continuous Stirred Tank
DF	Diferenças Finitas
DFC	Dinâmica de Fluidos Computacional
FCC	Fluid Catalytic Cracking
GLP	Gás Liquefeito de Petróleo
H/C	Relação Carbono e Hidrogênio
HCs	Hidrocarbonetos
LCV	Level Control Valve
MFIX	Multi-phase Flow with Interphase eXchange
PI	Proporcional Integral
REMAN	Refinaria de Manaus – Petrobras
RK	Runge-Kutta de quarta ordem
SIX	Superintendência de Industrialização do Xisto - Petrobras
TCV	Temperature Control Valve
VSS	Vaso Separador e Stripper

LISTA DE SÍMBOLOS

Nome	Descrição	Unidade
C_{ckst}	Teor de coque no catalisador	kg _{coque} /kg _{cat}
C _{ckst0}	Mínimo teor de coque atingível	kg _{coque} /kg _{cat}
k_{ss0}	Fator de freqüência na função de stripping	kg_{coque}/kg_{cat}
E_{ss}	Exponencial na função de stripping	s/kg
F_{cRS}	Vazão mássica de catalisador na saída do <i>riser</i>	kg/s
F_{ss}	Vazão mássica de vapor de stripping	kg/s
$F_{ m lg}$	Vazão mássica de gasóleo	kg/s
γ	Teor de coque no catalisador	kg _{coque} /kg _{cat}
k _{st}	Constante de stripping	-
ṁ	Vazão mássica	kg/s
Р	Pressão	kPa
Т	Temperatura	K
W	Teor de coque no catalisador	kg_{coque}/kg_{cat}
т	Massa	kg
У	Fração mássica dos componentes gasosos	
ρ	Massa específica	kg/m ³
k_v	Constante da válvula	$kg/s(kPa^{0,5})$
X_{v}	Posição de abertura da válvula	-
$\alpha_{_{v}}$	Razão entre a máxima e a mínima abertura da válvula	-
ΔP	Diferencial de pressão na válvula	kPa
A	Área de seção transversal	m^2
L	Altura do leito	m
ε	Porosidade	-
$arphi_p$	Esfericidade da partícula	-
g	Aceleração da gravidade	kg/ms ²

d_p	Diâmetro da partícula	m
μ	Viscosidade dinâmica	kPa.s
h	Entalpia	kJ/kg
c_p	Calor específico	kJ/(kg K)
T_{v}	Temperatura do vapor	К
T_{ref}	Temperatura de referência	К
R	Constante dos gases perfeitos	$(kPa.m^3)/(k_{mol}K)$
М	Massa molecular	kg/k_{mol}
V	Volume	m ³

Subscritos		
v	Vapor	
st	Stripper	
VS	Vaso separador e <i>stripper</i>	
cq	Coque	
с	Catalisador	
g	Gases	
i	Gol, gl, gs	
f	Fracionadora	
b	Base	
sc	Catalisador gasto	
LCV	Válvula de controle de nível	
Х	Saída do <i>riser</i>	
TCV	Válvula de controle de temperatura	

SUMÁRIO

AGRADECIMENTOS
RESUMO
ABSTRACT
LISTA DE FIGURAS
LISTA DE TABELAS
LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS
LISTA DE SÍMBOLOS
SUMÁRIO

1 IN	TRODUÇÃO	
1.1	DESCRIÇÃO DO PROCESSO DE CRAQUEAMENTO C	ATALÍTICO
	19	
1.2	MOTIVAÇÃO DO TRABALHO	21
1.3	OBJETIVOS DO TRABALHO	
1.4	ESTRUTURA DO TRABALHO	
2 RI	EVISÃO BIBLIOGRÁFICA	25
2.1	VASO SEPARADOR	
2.1	.1 REAÇÕES DE SOBRECRAQUEAMENTO	
2.1	.2 PROCESSO DE SEPARAÇÃO RÁPIDA	
2.2	STRIPPER	
2.3	HIDRODINÂMICA DO STRIPPER	
2.4	MODELOS DE EFICIÊNCIA PARA O STRIPPER	
2.5	MODELOS INTEGRADOS PARA FCC	
2.6	VARIÁVEIS OPERACIONAIS	
2.7	MODELO PROPOSTO	
3 FC	ORMULAÇÃO DO PROBLEMA	
3.1	GEOMETRIA E CONDIÇÕES INICIAIS	
3.2	OBTENÇÃO DAS EQUAÇÕES GOVERNANTES	
3.2	.1 BALANÇO DE MASSA.	42

	3.2.2	VARIAÇÃO DO NÍVEL DE CATALISADOR	45
	3.2.3	BALANÇO DE ENERGIA	46
	3.2.4	VARIAÇÃO DA PRESSÃO NO VSS	49
4	TRAT	CAMENTO NUMÉRICO	52
Z	1.1 MI	ÉTODOLOGIA DE SOLUÇÃO	
Z	1.2 MI	ÉTODO DE RUNGE-KUTTA	
	4.2.1	CRITÉRIO DE CONVERGÊNCIA	54
	4.2.2	ALGORITMO PARA O MÉTODO DE RUNGE-KUTTA	55
Z	4.3 MI	ÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS	
	4.3.1	DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO DIFERENCIAL ORDINÁRIA	57
	4.3.2	CRITÉRIO DE CONVERGÊNCIA	59
	4.3.3	ALGORITMO DE SOLUÇÃO	59
5	RESU	LTADOS	61
4	5.1 TE	STE DE SENSIBILIDADE PARA O INTERVALO DE TEM	PO62
	5.1.1	SENSIBILIDADE AO INTERVALO DE TEMPO UTILIZANDO O MÉTO	DO DE
	RUNGE	KUTTA DE QUARTA ORDEM	63
	5.1.2	SENSIBILIDADE AO INTERVALO DE TEMPO UTILIZANDO O MÉTO	DO DE
	DIFERE	NÇAS FINITAS	67
4	5.2 CC	OMPARAÇÃO COM DADOS DA LITERATURA	
	5.2.1	COMPARAÇÃO DO COMPARTAMENTO DINÂMICO DO MODELO C	OM A
	LITERA	TURA	70
	5.2.2	COMPARAÇÃO DO MODELO PROPOSTO COM A LITERATURA EM	REGIME
	ESTAC	ONÁRIO	74
5	5.3 CC	MPARAÇÃO COM DADOS EXPERIMENTAIS	74
5	5.4 CA	SOS ESTUDADOS	75
	5.4.1	MUDANÇA NA VAZÃO DE GASÓLEO – CASO 1	76
	5.4.2	MUDANÇA NA TEMPERATURA DE ENTRADA NO VSS – CASO 2	79
	5.4.3	MUDANÇA NA VAZÃO DE ENTRADA DE CATALISADOR GASTO N	O VSS –
	CASO 3	82	
6	CON	CLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	86
6	5.1 TR	ABALHOS FUTUROS	
RI	EFERÊ	NCIAS BIBLIOGRÁFICAS	89
OI	BRAS	CONSULTADAS	90
ΑI	PÊNDI	CE A	92
* * 1			<i>) L</i>

1 INTRODUÇÃO

O processo de craqueamento catalítico fluidizado, do inglês *Fluid Catalytic Cracking* (FCC), converte destilados pesados provenientes da destilação do petróleo, como gasóleos e resíduos para gasolinas e destilados médios usando craqueamento catalítico.

Originalmente, os processos de craqueamento surgiram da necessidade de produção de gasolina em quantidade e qualidade suficiente de modo a atender à crescente demanda desse combustível, em face do crescimento da indústria automobilística.

Até 1913, toda a gasolina produzida era obtida por destilação direta do petróleo, portanto, tanto a qualidade como a quantidade dependia unicamente do tipo de cru refinado. Como havia grande variedade de petróleos, havia também uma grande variação no rendimento e na qualidade das gasolinas.

O processo de FCC é hoje difundido em todo o mundo, devido principalmente a dois fatores:

 o primeiro consiste no fato de contribuir eficazmente com a refinaria no ajuste de sua produção às necessidades do mercado consumidor local e devido à sua grande flexibilidade operacional;

– o segundo fator que tornou consagrado o processo está ligado ao aspecto econômico. Devido à sua extraordinária rentabilidade, na transformação de frações residuais, de baixo valor comercial, em derivados nobres de alto valor, tais como gasolina e GLP, o craqueamento catalítico aumenta significativamente os lucros da refinaria, Abadie (1986).

Nos últimos cinqüenta anos muitas companhias construíram suas versões para o processo de craqueamento catalítico. Todas têm em comum um regenerador em leito fluidizado, um *riser* onde ocorrem as reações de craqueamento, processos de separação tanto no *riser* quanto no regenerador e uma seção de retificação, que remove os hidrocarbonetos do catalisador. Recentemente com o aumento do craqueamento de cargas mais pesadas, que geram mais coque, foram adicionados em alguns modelos de regenerador os resfriadores de catalisador (*catalyst coolers*). Foram também desenvolvidos novos projetos de injetores de carga para facilitar a atomização e vaporização, de modo a melhorar a mistura com o catalisador. Surgiram igualmente novos sistemas de separação, como ciclones fechados, que interrompem rapidamente as reações fazendo uma separação rápida entre catalisador e os hidrocarbonetos, Santos (2000).

1.1 DESCRIÇÃO DO PROCESSO DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO

O processo de craqueamento catalítico fluidizado, que consiste na quebra (*cracking*) de moléculas pesadas presentes nos gasóleos e resíduos por ação de um catalisador, é representado através do esquema da Figura 1.

A carga proveniente da destilação à vácuo (gasóleo + resíduo), após penetrar na unidade de FCC, é aquecida com produtos quentes que saem do processo através de permutadores do sistema de pré-aquecimento, e é encaminhada à base do riser. Neste ponto recebe uma grande quantidade de catalisador em alta temperatura (650 - 700°C), o que provoca a instantânea vaporização do óleo, fluidizando o catalisador. A ruptura das ligações possibilita o aparecimento de moléculas leves, principalmente compostos de 3 a 12 átomos de carbono (GLP e gasolina), devido à seletividade do catalisador usado. As reações provocam também a formação, em menor escala, de gases leves (C1 e C2), gasóleo leve, pesado e coque, este último depositando-se na superfície do catalisador. A parte final do riser é colocada no interior do vaso de separação. A deposição do coque provoca a desativação do catalisador, devido à considerável redução da área disponível aos reagentes (hidrocarbonetos). Com o objetivo de restaurar sua atividade, o catalisador inativado pelo coque é continuamente retirado do riser, enviado ao vaso de separação e posteriormente para um vaso de regeneração onde, por intermédio de uma injeção de ar e por ação da alta temperatura, o coque é queimado, restabelecendo sua atividade catalítica.



Figura 1 Esquema de um FCC – FCC en Revista (2001).

Imediatamente após a saída do *riser*, as partículas de catalisador, recobertas por coque e sob ação do próprio peso, tendem a cair ao fundo do vaso de separação, também conhecido impropriamente como reator (termo que entrou em desuso, pois as reações ocorrem no *riser* e não no vaso de separação). Como parte do processo, vapores de hidrocarbonetos ocupam os poros de catalisador e os espaços entre as partículas. De modo a recuperar parte destes produtos, principalmente os gases que estão alojados nos espaços entre as partículas, o catalisador gasto passa pelo retificador ou *stripper*.

1.2 MOTIVAÇÃO DO TRABALHO

Atualmente, a crescente incorporação de cargas residuais ao processo e a presença de óleos cada vez mais pesados, fizeram com que as unidades fossem ajustadas para processá-las. Isto levou as unidades a operarem no limite de seus equipamentos, sendo que estratégias de otimização foram implementadas para garantir uma alta rentabilidade. Considerando que qualquer fator que influencie positivamente o rendimento do processo é bem vindo, o conhecimento do comportamento de todas as variáveis do processo é de importância fundamental.

Para os estudos de controle e de otimização deve-se incorporar funções de regulação e otimização baseadas em um modelo viável para tempo real. Esta modelagem deverá representar o mais fielmente possível a dinâmica do processo, permitindo que cada ação de controle seja propagada para um horizonte pré-determinado, a fim de validar a qualidade do controle bem como impor uma dinâmica que satisfaça os requisitos de otimização e os limites operacionais da planta. A modelagem deve capturar dinâmicas relevantes para controle, levando em consideração as não-linearidades e as interações das variáveis do processo de FCC entre si e com outras unidades da planta.

Atualmente, os controladores de unidades de craqueamento têm seus regimes de operação baseados em modelos de espectografia de massa propostos na literatura. Estes modelos não se aplicam ao petróleo nacional que apresenta uma composição química diferente, gerando problemas de rendimento da maioria das unidades de FCC nas refinarias brasileiras. Os controladores existentes no mercado nacional são em sua maioria importados e desenvolvidos para o processo de petróleo leve, bem como a maioria dos equipamentos utilizados no processo de craqueamento, e como citado anteriormente o petróleo brasileiro é pesado. Portanto, um estudo que leve ao conhecimento, bem como a um melhor aproveitamento destes equipamentos e controladores deve ser considerado. Como o processo é complexo de ser modelado, cada vez mais trabalhos vem se dedicando a equipamentos específicos da unidade. Não obstante, o fato de uma retificação eficiente do catalisador após a etapa de reação a fim de remover os hidrocarbonetos residuais, sempre foi considerado como uma etapa muito importante para a melhoria da operação de uma unidade de FCC.

Há casos onde existe uma deficiência séria no processo de retificação, tendo-se como resultado um acréscimo na quantidade de ar requerida e elevação da temperatura no regenerador, o que contribui para a degradação do catalisador e em casos severos contribui para intensificar o desgaste do equipamento. Inclui-se ainda o fato de que o processo regenerativo do catalisador fica comprometido.

Em recente trabalho de Baptista *et al.*. (2002), foi avaliado o efeito da retificação de catalisador gasto em uma unidade industrial de FCC em operação, unidade da Petrobras – REMAN. Os resultados obtidos mostraram que há uma recuperação de cerca de 5 a 11% de produtos (em relação à massa da carga processada).

1.3 OBJETIVOS DO TRABALHO

A proposta deste estudo é desenvolver um modelo dinâmico detalhado para o vaso separador e *stripper* (VSS), que permita conhecer o efeito e importância das variáveis de interesse como pressão, temperatura, massa de gases e catalisador, fração de coque e nível do *stripper* no processo, além investigar a sensibilidade destas variáveis à perturbações neste sistema. Este modelo dinâmico deverá se acoplar a outros dois modelos: o do *riser* e do regenerador, formando assim um modelo completo para o FCC.

A solução do modelo matemático criado com base nas equações de conservação da massa e energia, e da geometria do VSS e das condições de contorno, é feita de forma numérica. Na solução do modelo numérico, formado por um conjunto de equações diferenciais ordinárias e algébricas, utiliza-se dois métodos numéricos: o método explícito de Runge-Kutta de

quarta ordem e uma discretização explícita das equações através do método de Diferenças Finitas.

O resultado final é a obtenção de um modelo físico simplificado que mostre as tendências comportamentais dos equipamentos, onde será possível manipular as variáveis de entrada destes equipamentos e observar seus efeitos, identificar os parâmetros de controle do processo, seguido da análise de sua sensibilidade, com um equacionamento matemático também simplificado que requer baixo tempo computacional para a obtenção de soluções numéricas. Isto viabiliza a validação a luz de medidas experimentais e o ajuste do modelo em tempo viável na prática. Uma vez validados com modelos disponíveis na literatura, os resultados poderão ser usados como uma ferramenta de auxílio nos vários estudos de processos de controle e otimização de unidades de craqueamento catalítico.

1.4 ESTRUTURA DO TRABALHO

Uma breve descrição dos assuntos a serem abordados nos capítulos seguintes é feita abaixo.

No segundo capítulo é feita uma revisão da fundamentação teórica com as pesquisas relacionadas ao assunto deste trabalho, apresentando os modelos matemáticos pertinentes à modelagem matemática do processo de retificação de unidades de FCC.

O terceiro capítulo descreve, de forma detalhada, a modelagem matemática a ser utilizada tendo como base a revisão feita no capítulo anterior.

O quarto capítulo descreve o tratamento dado às equações governantes pelos métodos de Diferenças Finitas e Runge-Kutta de quarta ordem, e a metodologia utilizada no cumprimento dos objetivos do presente trabalho.

No capítulo quinto encontram-se os resultados obtidos com a simulação numérica, assim como as discussões dos mesmos.

Capitulo 1 Introdução

As conclusões do trabalho sobre a metodologia proposta, os resultados alcançados e as recomendações estão no sexto capítulo.

Na seqüência apresenta-se as referências bibliográficas consultadas para a elaboração do trabalho e o apêndice A, que visam possibilitar um melhor entendimento do trabalho.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo é apresentada uma revisão da literatura relacionada ao vaso separador e *stripper*. Inicialmente é relatado as principais configurações existentes e seus aspectos funcionais. Na seqüência são apresentados alguns trabalhos de modelagem do processo de FCC, onde se tem a inclusão dos modelos dinâmicos do vaso separador e *stripper*, tratado a partir de agora de VSS e o reconhecimento da importância dos mesmos na eficiência global do processo.

Ao final é feita a exposição do modelo proposto neste trabalho e suas variáveis operacionais.

2.1 VASO SEPARADOR

O vaso de separação é destinado a propiciar um espaço físico para que ocorra a separação inercial entre as partículas de catalisador gasto, que durante as reações de craqueamento no *riser* vai perdendo a sua atividade pela deposição de coque em sua superfície catalítica e os gases provenientes do craqueamento.

Esta separação é feita pela diminuição súbita da velocidade dos vapores em ascensão, que saem do *riser*. A temperatura dos gases é aproximadamente a mesma da saída do *riser*, situando-se entre 490 e 550°C, conforme o tipo da carga, o catalisador e o interesse na maximização da produção de um determinado produto (GLP ou gasolina).

Partículas finas de catalisador que sobem junto com a corrente gasosa (vapores de hidrocarbonetos craqueados, vapor d'água e gases inertes) provenientes do *riser*, são retidas pelos ciclones no vaso separador, sendo posteriormente devolvidas ao leito do catalisador. A grande vazão de gases produzidos no craqueamento realizado no *riser*, carreando as partículas sólidas, ao deixar o vaso de separação tem como único caminho a passagem obrigatória pelo conjunto de ciclones. O efluente gasoso, com teor de pó bastante reduzido, sai pela parte superior de cada equipamento, sendo reunido num local de coleta denominado câmara plena. Segue então através de uma linha de transferência para a seção de fracionamento, onde, por meio de uma torre de destilação, há uma separação preliminar de produtos como gasolina, GLP e gases combustíveis.

Um esquema de vaso separador pode ser observado na Figura 2, onde estão representadas a terminação do *riser*, ciclones e câmara plena.



Figura 2 Vaso separador com riser interno.

2.1.1 REAÇÕES DE SOBRECRAQUEAMENTO

As reações de sobrecraqueamento ocorrem na parte terminal do *riser* na qual o catalisador está com atividade bastante reduzida e a conversão em

produtos nobres em grande parte já foi realizada. Nesta região predomina, portanto, o sobrecraqueamento térmico sobre o craqueamento catalítico, gerando alto percentual de gases leves e de coque em detrimento de produtos nobres.

Os projetos modernos minimizam esta região fazendo com que o craqueamento ocorra essencialmente no *riser*, reduzindo o tempo de contato, incluindo os dispositivos de separação rápida entre os hidrocarbonetos e o catalisador.

2.1.2 PROCESSO DE SEPARAÇÃO RÁPIDA

Os dispositivos utilizados são vários e dependem de cada projetista. O objetivo da separação rápida é aumentar a seletividade do craqueamento, de modo a:

- Aumentar o rendimento de produtos líquidos, principalmente gasolina e

- Diminuir a produção de coque e gás.

A Figura 3 mostra um esquema utilizado para separação rápida, onde se tem a separação do catalisador e dos gases, as partículas finas de catalisador que são arrastadas pelos gases, são retidas pelos ciclones e devolvidas ao leito de catalisador. Os produtos com teor de partículas bastante reduzido saem pela parte superior dos ciclones e seguem através de uma linha de transferência para a seção de fracionamento.



Figura 3 Vaso separador de separação rápida.

2.2 STRIPPER

O *stripper* mostrado na Figura 4 é colocado imediatamente abaixo do vaso de separação, e tem como internos uma série de defletores convergentedivergente conforme Figura 4a, ou de defletores alternados conhecidos como chicanas, como mostra a Figura 4b.

Na parte inferior do *stripper*, é colocado um anel com vários furos, por onde é injetado o vapor d'água para a retificação.



4 a) Defletores

4 b) Chicanas

Figura 4 Modelos de internos de stripper.

A contínua descida do catalisador gasto através das chicanas, recebendo em contracorrente o fluxo ascendente de vapor proveniente do fundo do retificador, recupera considerável quantidade de hidrocarbonetos, sendo o responsável por esta recuperação o vapor injetado no *stripper*, que arrasta os hidrocarbonetos. O processo de retirada dos hidrocarbonetos adsorvidos nos poros do catalisador pelo vapor de *stripping* ocorre por difusão, o vapor d'água em corrente ascendente causa a revaporização das moléculas mais leves contidas nos poros do catalisador, como nafta, GLP e gases combustíveis, evitando assim que os hidrocarbonetos com grande valor agregado sejam enviados ao regenerador e queimados como coque. As moléculas mais pesadas do coque (coque insolúvel) depositadas na zeólita, componente do catalisador de FCC, não podem ser removidas durante a etapa de retificação, pois apresentam baixa volatilidade (alto ponto de ebulição) e se encontram estericamente bloqueadas no interior dos poros do catalisador. O coque compõe-se basicamente de carbono e hidrogênio, contendo ainda pequenas quantidades de enxofre, nitrogênio e metais. A relação hidrogêniocarbono no coque pode variar de 0,8 a 1,1 molar dependendo do projeto do *stripper* e do grau de retificação com vapor do catalisador gasto.

O vapor d'água que faz a operação de retificação mistura-se com os gases de craqueamento no vaso de separação, seguindo com estes para a seção de fracionamento. O catalisador gasto retificado sai pelo fundo do *stripper* e, por meio de um duto denominado *stand-pipe*, é transferido ao regenerador.

Coque catalisador-óleo

Hidrocarbonetos retidos entre os poros e as partículas de catalisador, caso não sejam suficientemente removidos no *stripper* (coque catalisadoróleo), serão queimados no regenerador como se fosse coque. Não sendo portanto um tipo verdadeiro de coque.

O coque catalisador-óleo é diretamente proporcional à eficiência da retificação. Retificadores industriais tem boa eficiência para retirar os hidrocarbonetos existentes entre as partículas em escoamento, mas não são eficazes para remover os hidrocarbonetos adsorvidos nos poros do catalisador.

As variáveis que afetam a formação de coque catalisador/óleo são: a taxa de circulação de catalisador, a temperatura, a eficiência da retificação e as propriedades das partículas. Baixa área superficial e grande diâmetro médio dos poros são propriedades que facilitam a retificação. O tempo de residência do catalisador no retificador também é decisivo na remoção de hidrocarbonetos, tanto quanto a vazão de vapor de retificação.

2.3 HIDRODINÂMICA DO STRIPPER

Para investigar a hidrodinâmica ocorrente no *stripper*, geralmente são utilizados procedimentos experimentais, e atualmente também Dinâmica de Fluidos Computacional (DFC). Percebe-se que há uma preocupação crescente em se estudar este fenômeno, por se tratar de um ponto fundamental quando se deseja obter formas de melhorar a eficiência do *stripper*, tornando-se um dos parâmetros mais significativos para a melhora na retificação.

Os autores McKeen *et al.* (2002) consideram seu trabalho um dos primeiros a estudar a hidrodinâmica do *stripper* usando dinâmica de fluidos computacional. A solução numérica foi feita com o código MFIX e os resultados obtidos comparados com valores experimentais. O modelo é bifásico e isotérmico, permitindo avaliar a velocidade do gás de *stripping* e o fluxo de massa do catalisador.

Um outro estudo, realizado por Liu *et al.* (2002), tendo como base um estudo preliminar desenvolvido por Kejia Xu (1998), investigou a fração de vazios e a velocidade de circulação das partículas no leito, de forma numérica e experimental tendo como objetivo obter a influência da fração de vazios e velocidade das partículas na eficiência do *stripper*. Como resultado foi estabelecido um modelo para eficiência de *stripping*, concordando com resultados experimentais. Os testes mostraram que quando se aumenta a velocidade do gás, obtém-se uma eficiência superior a 97%, revelando que o modelo experimental investigado proporciona um alto contato entre as fases gás-sólido, sendo isto comprovado numericamente.

2.4 MODELOS DE EFICIÊNCIA PARA O STRIPPER

A eficiência da retificação pode ser acompanhada pelo teor de hidrogênio no coque. Em condições normais, este valor situa-se entre 7 e 9% em peso. Um aumento da razão H/C no coque é uma segura indicação que hidrocarbonetos em excesso estão sendo arrastados pelo catalisador e queimados, demonstrando uma deficiência na retificação.

Observando que a maioria dos modelos apresentados na literatura para a eficiência do *stripper* foram obtidos de forma empírica, tem-se como exemplo o trabalho experimental de Baptista *et al.* (2002) realizado na Petrobras (REMAN), onde foi avaliado o efeito da retificação de catalisador gasto em uma unidade industrial de FCC em operação. Foram definidas duas condições operacionais distintas, de modo a avaliar a unidade nas condições em que

vinha operando e o impacto provocado pelo aumento da vazão de vapor de retificação. Não houve variação na carga processada. Os resultados obtidos mostraram que há uma recuperação de cerca de 5 a 11% de produtos (em relação à massa da carga processada).

Uma forma de quantificar a eficiência do *stripper* é avaliar o índice de remoção da porção de hidrocarbonetos que permanece nos poros do catalisador após a separação das fases que ocorre no vaso separador, pelo *stripper*. Parte destes hidrocarbonetos podem ser removidos no *stripper* pelo vapor d'água. No trabalho de Han *et al.* (2001) a equação (1) é utilizada para avaliar o coque catalisador-óleo, como são chamados os hidrocarbonetos que não são removidos pelo *stripper* e são convertidos em coque no regenerador.

$$C_{ckst} = C_{ckst0} + k_{ss0} \exp\left[-\frac{E_{ss}F_{cRS}F_{ss}}{F_{lg}}\right]$$
(1)

Na equação (1) C_{ckst} é a fração de coque catalisador-óleo, C_{ckst0} é a quantidade mínima recuperada, k_{ss0} é uma constante de *stripping*, E_{ss} expoente na função do *stripper*, F_{cRS} é a vazão de catalisador na saída do riser, F_{ss} é a vazão de vapor de *stripping* e F_{lg} é a vazão de gasóleo, na entrada do riser.

No trabalho de Arbel *et al.* (1995), a equação utilizada é unicamente uma função da vazão do vapor de *stripping*, como mostra a equação (2). A expressão de γ considera que o catalisador que sai do vaso separador possui 0,2% de hidrocarbonetos, e que uma máxima retificação leva a 0,02% de hidrocarbonetos no catalisador que sai do *stripper*.

$$\gamma = 0,0002 + 0,0018(1 - k \cdot \dot{m}_{vst})$$
⁽²⁾

onde γ e a fração de coque catalisador-óleo, k representa o coeficiente do vapor de *stripping* e possui o valor de 0,008, \dot{m}_{vst} é a vazão de vapor para *stripping*.

As equações (1) e (2) podem ser utilizadas em equipamentos que utilizam separadores convencionais. No caso dos dispositivos de separação rápida um estudo mais aprofundado deverá ser realizado para determinação de sua função.

2.5 MODELOS INTEGRADOS PARA FCC

Existem poucos trabalhos que são dirigidos diretamente para o vaso separador e *stripper*. Normalmente na modelagem do processo global, tais equipamentos são tratados de forma sucinta e os modelos que representam o seu comportamento dinâmico são assumidos como tanques de mistura contínua (CST) do inglês, *Continuous Stirred Tanks*, onde não ocorrem reações químicas e a modelagem consiste em balanços de massa, energia e avaliação da pressão.

No trabalho de Arandes *et al.* (2000), um modelo para FCC foi construído considerando o *stripper* um componente fundamental da planta da unidade. Em outros trabalhos, este é quase sempre negligenciado, causando uma dificuldade adicional nas estimativas das várias taxas de reações como a de craqueamento, formação de coque e regeneração do catalisador, que são de grande impacto na simulação da unidade. O *stripper* é modelado como um CST e apresenta um balanço de energia simplificado, para regime permanente, sendo que a temperatura depende apenas das vazões de entrada e saída de catalisador gasto, devido à grande contribuição do catalisador comparado ao do vapor de água utilizado para promover a retirada de hidrocarbonetos adsorvidos na superfície do catalisador. A variação de temperatura é calculada utilizando um balanço de energia em estado estacionário. Os resultados obtidos para o estado estacionário e operação dinâmica apresentaram boa concordância com resultados da planta. Os contraladores do

tipo Proporcional-Integral (PI), para *loop* fechado, mostraram-se satisfatórios quando a planta foi submetida a variações em vários parâmetros de controle.

Pathanjali *et al.* (1999) apresentaram uma modificação no modelo de Ali e Rohani (1997). Neste modelo, considera-se que a unidade de FCC se restringe ao *riser* e regenerador. A modificação consiste na inclusão de balanços de massa e energia no vaso separador e *stripper*, que não eram representados no modelo de Ali e Rohani (1997). As modificações implementadas têm por objetivo representar de forma mais real o processo de FCC. Seus resultados foram validados pela comparação com dados de uma planta industrial, mostrando que o modelo comporta-se melhor que o modelo proposto originalmente por Ali e Rohani (1997), sem perder a simplicidade e a flexibilidade.

As considerações para o modelo de Pathanjali *et al.* (1999) são: a taxa de fluxo de vapor é pequena (menor que 0,25% do fluxo de catalisador), portanto, o efeito do vapor no balanço de energia é assumido como sendo desprezível; o tempo de residência do catalisador dentro do sistema VSS é da ordem de 5 a 6 minutos; são modelados como um CST e o leito de catalisador é assumido estar em mínima fluidização. As equações obtidas para a representação do modelo são equações diferenciais ordinárias e algébricas.

Um modelo onde o VSS é combinado em uma única seção chamada de *disengaging-stripping* (separação-retificação) foi desenvolvido por In-Su Han *et al.* (2001). A seção é modelada como um CST onde não ocorrem reações. A modelagem compreende o balanço de coque, catalisador e componentes gasosos, incluindo também balanço de energia e pressão. Os dados fornecidos pelo modelo são: coque no catalisador na saída do *stripper*, massa de catalisador e gás na seção, a concentração dos componentes gasosos que são enviados à fracionadora, bem como a temperatura e a pressão no topo e na base da seção. Os resultados obtidos mostraram-se em boa concordância com resultados da literatura e também com os de uma planta industrial.

No trabalho proposto por Santos (2000), o vaso de separação é modelado como um tanque de mistura perfeita e adiabático. São realizados balanços de massa e energia, sendo o balanço de energia distinto para o vaso separador e *stripper*. Para o balanço de energia no *stripper*, a vazão de hidrocarbonetos retificados é considerada desprezível. O modelo fornece o comportamento da temperatura, pressão, teor de coque no catalisador, massa de gás e catalisador.

De maneira a facilitar o entendimento, os trabalhos mais relevantes no que se refere à modelagem dinâmica do processo, encontram-se resumidos na Tabela 1.
Tabela 1 Resumo dos modelos mais relevantes encontrados na literatura.

Autores	Considerações	Dados fornecido	s	Conclusões
Arandes <i>et al.</i> (2000)	 i. CST onde não ocorrem reações; ii. Contribuição de vapor e gases desprezados no balanço de energia; iii. Variação da temperatura em estado estacionário; iv. Adiabático. 	 Fração de coque na saída o Altura do nível do leito no Temperatura no VSS; Pressão no topo do VSS. 	do <i>stripper</i> ; stripper;	Os resultados do modelo, tanto para operação em estado estacionário ou dinâmico apresentam boa concordância com os resultados obtidos em uma planta comercial.
Pathanjali <i>et al.</i> (1999)	 i. CST onde não ocorrem reações; ii. Contribuição de vapor e gases desprezados no balanço de energia; iii. Mínima Fluidização; iv. Adiabático. 	 Fração de coque na saída o Altura do nível do leito no Temperatura no VSS; Pressão no topo do VSS. 	do <i>stripper</i> ; o <i>stripper</i> ;	Seus resultados mostram que o modelo comporta-se melhor que o modelo proposto originalmente por Ali e Rohani (1997), sem perder a simplicidade e a flexibilidade.
In su Han <i>et al.</i> (2001)	 i. CST onde não ocorrem reações; ii. Contribuição de vapor e gases no balanço de energia; iii. Considera a formação de coque formado pelos hidrocarbonetos que são enviados ao regenerador. 	 Fração de coque na saída e Massa de catalisador e gas Temperatura; Pressão na base e no topo; Fração dos gases na s fracionadora; Fração de coque catalisado 	do <i>stripper</i> ; ses; saída para a or-óleo;	As respostas da etapa dinâmica apresentada mostram respostas inversas típicas e o comportamento não-linear que se origina da complexa interação entre o reator e a dinâmica do regenerador.
Santos (2000)	 i. CST onde não ocorrem reações, adiabático; ii. Contribuição de vapor e gases no balanço de energia; iii. Considera a formação de coque formado pelos hidrocarbonetos que são enviados ao regenerador; iv. O balanço de energia é realizado separadamente para o vaso separador e <i>stripper</i>; 	 Fração de coque na saída o Temperatura no vaso <i>stripper;</i> Pressão no topo; 	do <i>stripper</i> ; separador e	As pressões apresentadas pelos modelos e pela planta após o mesmo degrau na carga apresentam a mesma resposta. As pressões obtidas são muito próximas às encontradas na planta, demonstrando assim um equacionamento do modelo.
Modelo Proposto	 i. Conjunto vaso separador e <i>stripper</i> (CST); ii. Não ocorrem reações, adiabático; iii. Consideração de vapor e gases no balanço de energia; iv. Considera a formação de coque formado pelos hidrocarbonetos que são enviados ao regenerador; 	 Fração de coque na saída e Temperatura no vaso <i>stripper;</i> Pressão no topo e base do Fração de coque catalisado Massa de catalisador e gás Massa específica dos gase 	do <i>stripper;</i> separador e VSS; pr-óleo; s; s.	As conclusões do modelo proposto encontram-se no capítulo 6 deste trabalho.

2.6 VARIÁVEIS OPERACIONAIS

O conjunto VSS separa os produtos gasosos do catalisador no vaso separador e promove retificação através do *stripper*. O diferencial de pressão entre o VSS e o regenerador é mantido pelo nível de catalisador no *stripper*.

As variáveis que serão abordadas neste trabalho, e que têm a função de preservar a integridade do sistema, mantendo os fluxos nos sentidos corretos, como o controle do diferencial de pressão entre o VSS e o regenerador e o nível do catalisador no VSS, e que são utilizadas no controle do conversor de FCC, estão apresentadas abaixo. As variáveis envolvidas podem pertencer a uma malha de controle ou ser apenas monitorada e controlada manualmente.

Para que haja uma boa retificação e o diferencial de pressão seja mantido, as seguintes variáveis devem ser observadas:

Vazão de vapor de stripping

A vazão de vapor tem um limite máximo, a partir do qual não se obtém mais resultados positivos. Para identificar a vazão correta de vapor de retificação é normal aumentar-se esta corrente em pequenos incrementos, de modo a observar o efeito sobre a temperatura do regenerador, até que se atinja uma vazão tal que acima da mesma não se note diminuição da temperatura do regenerador. Abaixo desse valor, observa-se um aumento na temperatura da regeneração.

Nível de catalisador no VSS

O controle do nível do VSS é utilizado para manter uma pressão maior a montante da válvula LCV (*Level Control Valve*) que controla o nível de catalisador no VSS. Caso contrário, pode haver reversão de fluxo, ou seja, ar do regenerador passar para o VSS, o que pode levar a explosão do mesmo.

Diferencial de pressão entre o VSS e o regenerador

Esta variável é importante para a segurança do sistema, pois garante a circulação de catalisador no sentido requerido, impedindo que haja reversão de fluxo que teria conseqüências catastróficas podendo chegar a uma explosão do mesmo.

2.7 MODELO PROPOSTO

O modelo proposto tem como inovação o fato de incluir particularidades de todos os modelos apresentados na literatura. Sendo assim, este modelo procura englobar todos os parâmetros significativos do processo de separação e retificação. Como a modelagem dinâmica destes equipamentos na literatura só é encontrada na modelagem do processo global, este detalhamento não é observado, devido ao fato da modelagem absorver um grande esforço computacional para resolução do conjunto de equações resultantes, quando se inclui as equações referentes a modelagem do *riser* e regenerador. No presente trabalho, procurou-se agrupar as informações da literatura de forma a obter-se um modelo capaz de descrever bem a dinâmica do processo e que não demande um esforço computacional excessivo. Neste sentido, foi sugerido o modelo que passa a ser descrito no próximo capítulo.

3 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

3.1 GEOMETRIA E CONDIÇÕES INICIAIS

Para a elaboração do modelo matemático, é necessário o conhecimento da física que envolve o problema. Na Figura 5, que mostra a representação esquemática do conjunto VSS, são realizados balanços de massa para o catalisador e os gases (hidrocarbonetos e vapor d'água), balanço de energia efetuados no vaso separador e *stripper* e também a avaliação da pressão. Nesta figura, identifica-se a entrada de gases e catalisador provenientes do *riser* na parte superior do vaso separador, onde ocorre a separação inercial das partículas pelos ciclones, de modo a se obter uma corrente sólida e uma gasosa. A saída de gases pelo topo do vaso separador inclui os hidrocarbonetos vindos do *riser* e o vapor do *stripper* (parte inferior).



nes e catansador para o regenerador

Figura 5 Representação esquemática do modelo.

O catalisador gasto (recoberto por coque), passa pelo vaso separador e cai no *stripper* onde se verifica a entrada de vapor d'água para retificação. Este vapor mais os hidrocarbonetos recuperados são enviados para o vaso separador e em seguida enviados para a fracionadora, juntamente com os gases provenientes do *riser*. O catalisador gasto e retificado, com algum hidrocarboneto remanescente, é então enviado ao regenerador onde é queimado de maneira a restabelecer sua atividade catalítica.

Condições de contorno e dados referentes à geometria do equipamento foram obtidos a partir da planta multipropósito de FCC, fornecidas pela Superintendência da Industrialização do Xisto (SIX) em São Mateus do Sul. Ressalta-se que algumas informações não foram fornecidas por medidas de sigilo da Petrobras, sendo necessária a utilização de alguns dados teóricos. Para validação do modelo, foram utilizadas as condições iniciais mostradas no trabalho de Han *et al.* (2001), que serão apresentadas posteriormente.

As condições iniciais consideradas são a pressão do gás no vaso separador (P_{vs}), a temperatura no conjunto VSS (T_{vs}), a fração de coque na saída do *stripper* ($w_{cq,st}$), a fração dos componentes gasosos ($y_{i,vs}$), a massa específica dos gases ($\rho_{g,vs}$) e a massa de catalisador ($m_{c,vs}$) e gases ($m_{g,vs}$) no conjunto VSS.

As seguintes considerações foram feitas para o modelo proposto:

- O conjunto vaso separador e stripper é considerado como tanque de mistura perfeita (CST), onde não ocorrem reações;
- Adiabático;
- Os ciclones são considerados adiabáticos;
- A aeração do leito do *stripper* é proporcionada e mantida pela injeção de vapor de *stripping*;

- Para o balanço de energia, não são considerados os hidrocarbonetos recuperados no stripper;
- A área do vaso separador e *stripper*, bem como a massa específica dos sólidos, são consideradas constantes.

3.2 OBTENÇÃO DAS EQUAÇÕES GOVERNANTES.

No item 3.1, foram efetuadas considerações a respeito das hipóteses e simplificações realizadas na elaboração do modelo desenvolvido neste trabalho. A descrição do fenômeno físico apresentado será agora estabelecida na forma de equações matemáticas. Algumas manipulações algébricas serão necessárias, de forma a obter-se as equações representativas do modelo. A obtenção das equações foram embasadas nas condições de entrada e saída, que podem ser observadas na Figura 6.



Figura 6 Esquema do modelo de estudo.

A Figura 6 mostra todas as variáveis envolvidas na modelagem, bem como a interligação com os demais equipamentos da unidade de FCC, o *riser* e o regenerador. A vazão de gasóleo (\dot{m}_{gol}) na entrada do *riser* determina a quantidade de gás na entrada do VSS, a vazão mássica de catalisador na saída do regenerador $(\dot{m}_{c,TCV})$ e considerada igual a vazão de catalisador na saída do *riser*.

3.2.1 BALANÇO DE MASSA.

O balanço de massa para os gases que são provenientes do *riser* e que passam pelo VSS e se encaminham à fracionadora principal, compreendem hidrocarbonetos e vapor d'água e também a fração de hidrocarbonetos que será enviada ao regenerador e queimada como coque, que podem ocorrer devido a uma retificação ineficiente no *stripper*. Pode-se escrever esse balanço de massa baseado na Figura 6, como:

$$\frac{dm_{g,vs}}{dt} = \dot{m}_{g,x} + \dot{m}_{v,st} - \dot{m}_{g,f} - \dot{m}_{c,x} \cdot \gamma$$
(3)

onde $m_{g,vs}$ é a massa de gás no VSS, $\dot{m}_{g,x}$ é a vazão de gases provenientes do riser, composta de hidrocarbonetos e vapor d'água, $\dot{m}_{v,st}$ é a vazão de vapor de stripping e $\dot{m}_{g,f}$ é a vazão de gases para a fracionadora. O termo $\dot{m}_{c,x} \cdot \gamma$ representa a porção de hidrocarbonetos que não foram retificados no stripper e serão queimados no regenerador, onde $\dot{m}_{c,x}$ é a vazão de catalisador e γ é a fração de coque catalisador-óleo.

O balanço de massa de catalisador é representado por:

$$\frac{dm_{c,vs}}{dt} = \dot{m}_{c,x} - \dot{m}_{c,LCV} \tag{4}$$

sendo $\dot{m}_{c,x}$ a vazão de catalisador na saída do *riser* e $\dot{m}_{c,LCV}$ a vazão de catalisador na saída do *stripper*, sendo a vazão na saída controlada por uma válvula LCV.

Válvula de controle de vazão

As vazões de catalisador e gás que saem do VSS controladas por válvulas correspondem a: saída de gás para a fracionadora principal e saída de catalisador gasto do *stripper*, sendo dadas em função do diferencial de pressão das válvulas:

$$\dot{m} = \frac{k_v X_v}{\sqrt{\alpha_v + (l - \alpha_v) X_v^2}} \sqrt{\Delta P}$$
(5)

onde k_v é a constante da válvula, X_v , a posição de abertura da válvula, α_v , a razão entre a posição de máxima e mínima abertura da válvula e ΔP é o diferencial de pressão entre o VSS e a fracionadora principal para a vazão dos gases e entre o VSS e o regenerador para a vazão de catalisador gasto e \dot{m} é a vazão, Han *et al.* (2001a).

A fração de coque na saída do VSS é depende do teor de coque na saída do *riser*, composto do coque cinético e coque remanescente e dos hidrocarbonetos não retificados, que também é chamado de coque catalisadoróleo. Para determinar a fração de coque na saída do *stripper* temos a equação (6):

$$m_{c,vs} \frac{dw_{cq,st}}{dt} = \dot{m}_{c,x} \left(w_{cq,x} - w_{cq,st} + \gamma \right)$$
(6)

onde $m_{c,vs}$ é a massa de catalisador no vaso separador/stripper, $w_{cq,st}$ é a fração de coque na saída do stripper, $\dot{m}_{c,x}$ é a vazão de catalisador na saída do riser, $w_{cq,x}$ é o teor de coque no catalisador gasto na saída do riser. $w_{cq,x}$ compreende o coque remanescente (que não foi queimado no regenerador, permanecendo na superfície do catalisador), e que passa pela TCV (*Temperature Control Valve*) reguladora da saída de catalisador do regenerador para o *riser* e o coque cinético que é o formado pelas reações de craqueamento que ocorrem no *riser*.

A fração de coque catalisador-óleo γ , é avaliada pela equação (2), apresentada no capítulo 2.

A fração mássica dos componentes gasosos que deixam o vaso separador, e são enviados à fracionadora principal, podem ser avaliadas conforme as equações (7), e foram embasados no trabalho de Han *et al.* (2001):

$$\frac{dy_{i,vs}}{dt} = \frac{1}{m_{g,vs}} \left[y_{i,x} \left(\dot{m}_{g,x} - \frac{\dot{m}_{c,x} \cdot \gamma}{\sum_{j=gol,gl,gs}} \right) - y_{i,vs} \left(\dot{m}_{g,f} + \frac{dm_{g,vs}}{dt} \right) \right] \qquad i = gol, \ gl, \ gs \quad (7)$$

onde, y_i é a fração do componente gasoso *i*, sendo *gol* o gasóleo, *gl* a gasolina e *gs* os gases leves. As vazões de entrada e saída dos gases no VSS são representadas, por $\dot{m}_{g,x}$ que é a vazão de gases e $\dot{m}_{c,x}$ é a vazão de catalisador na saída do *riser*, $\dot{m}_{g,f}$ é a vazão de saída dos gases para a fracionadora. Lembrando que a vazão de saída é controlada pelo diferencial de pressão, conforme a equação (5). Sendo $m_{g,vs}$ a massa de gases no VSS, incluindo hidrocarbonetos e vapor de água e γ é o teor de coque catalisador-óleo, de acordo com a equação (2).

Para se determinar a fração de vapor que deixa o vaso separador utilizase a equação (8):

$$y_{v,vs} = l - y_{gol,vs} - y_{gl,vs} - y_{gs,vs}$$
(8)

onde $y_{v,vs}$ é a fração de vapor no VSS, e os demais são frações de gasóleo, gasolina e gases leves, na ordem em que são mostrados.

3.2.2 VARIAÇÃO DO NÍVEL DE CATALISADOR

O nível de catalisador no *stripper* é uma variável importante, pois é responsável pelo controle do diferencial de pressão entre o regenerador e o VSS, sendo uma eventual mudança no nível de catalisador com o tempo representado pela equação (11), que é derivada da equação (4).

$$\frac{d(\rho_c(1-\varepsilon)V_c)}{dt} = \dot{m}_{c,x} - \dot{m}_{c,LCV}$$
(9)

sendo que ρ_c é a massa específica do catalisador e V_c é o volume ocupado pelo catalisador no VSS. Considerando que a massa específica do catalisador é constante e que o catalisador gasto após ser separado dos gases, ocupa somente o *stripper*, formando seu leito com porosidade ε , pode-se então avaliar seu volume, como mostra a equação (10):

$$V_c = A_{st} L_{st} \tag{10}$$

onde L_{st} é o nível de catalisador no *stripper*, A_{st} é a área de seção transversal do *stripper* e ε é a porosidade no *stripper*.

Substituindo a equação (10) em (9), temos:

$$\frac{dL_{st}}{dt} = \frac{\dot{m}_{c,x} - \dot{m}_{c,LCV}}{\rho_c (l - \varepsilon) A_{st}}$$
(11)

sendo esta a forma utilizada no trabalho de Arandes *et al.* (2000) para avaliar a variação no nível do *stripper*.

Podendo a equação (11) ser escrita na forma da equação (12), visto que a maior influência na variação do nível de catalisador é a massa de catalisador que ocupa o VSS e sendo a variação da massa de catalisador avaliada pela

equação (4), podemos escrever a equação (11), na forma de uma equação algébrica.

$$L_{st} = \frac{m_{c,vs}}{\rho_c (l-\varepsilon) A_{st}}$$
(12)

onde $m_{c,vs}$ é a massa de catalisador no conjunto VSS.

Para a porosidade do leito ε , consideradas as condições de mínima fluidização foi usada a correlação de Broadhurst e Becker (1975), que também é utilizada no trabalho de Santos (2000) e é dada pela equação (13):

$$\varepsilon = 0.586 \varphi_p^{-0.72} \left[\frac{\mu^2}{\rho_{g,vs} g(\rho_c - \rho_{g,vs}) d_p^3} \right]^{0.029} \left(\frac{\rho_{g,vs}}{\rho_c} \right)^{0.021}$$
(13)

onde ε é a porosidade, φ_p é a esfericidade média da partícula, μ é a viscosidade dinâmica, $\rho_{g,vs}$ e ρ_c são, respectivamente a massa específica do gás e do catalisador no VSS, sendo g a aceleração da gravidade e d_p o diâmetro médio da partícula.

3.2.3 BALANÇO DE ENERGIA

O balanço de energia considera que a variação da temperatura depende das vazões e entalpia de entrada e saída do catalisador, coque, gases e vapor de água. Sendo o calor específico do catalisador constante e o calor específico do coque, dos gases e vapor dependentes da temperatura, obtém-se:

$$\frac{dh_{vs}}{dt} = \frac{dh_{c,vs}}{dt} + \frac{dh_{g,vs}}{dt} + \frac{dh_{cq,vs}}{dt} + \frac{dh_{v,vs}}{dt}$$
(14)

onde h_{vs} , $h_{c,vs}$, $h_{cq,vs}$, $h_{g,vs}$ são respectivamente as entalpias do VSS, catalisador, coque e gases e $h_{v,vs}$ é a entalpia do vapor.

Sendo que a entalpia pode ser representada conforme a equação (15):

$$h = \dot{m}c_p T \tag{15}$$

e substituindo a equação (15) na equação (14), temos:

$$\frac{dh_{vs}}{dt} = \frac{d(m_{c,vs}cp_{c}T_{vs})}{dt} + \frac{d(m_{cq,vs}cp_{cq}T_{vs})}{dt} + \frac{d(m_{g,vs}cp_{g}T_{vs})}{dt} + \frac{d(m_{v,vs}cp_{v}T_{vs})}{dt} + \frac{d(m_{v,vs}cp_{v}T_{vs})}{dt}$$
(16)

onde $m_{c,vs}$ é a massa de catalisador e $m_{cq,vs}$ é a massa de coque, $m_{g,vs}$ e $m_{v,vs}$ são, respectivamente a massa de gás e vapor no VSS. O calor específico do gás é representado por cp_g , para o catalisador cp_c , coque cp_{cq} e para o vapor temos cp_v . T_{vs} é a temperatura do VSS.

Rearranjando a equação (16), e considerando que o calor específico não varia com o tempo, temos a equação (17):

$$\frac{dh_{vs}}{dt} = T_{vs} \left[\frac{d(m_{c,vs})}{dt} cp_{c} + \frac{d(m_{cq,vs})}{dt} cp_{cq} + \frac{d(m_{g,vs})}{dt} cp_{g} + \frac{d(m_{v,vs})}{dt} cp_{v} \right]
+ \frac{dT_{vs}}{dt} \left[m_{c,vs} cp_{c} + m_{cq,vs} cp_{cq} + m_{g,vs} cp_{g} + m_{v,vs} cp_{v} \right]$$
(17)

Invocando a equação de conservação da massa, temos:

para o catalisador e o coque,

$$\frac{d(m_{i,vs})}{dt} = \dot{m}_{i,x} - \dot{m}_{i,LCV} \qquad \qquad i = c, \ cq$$

$$\tag{18}$$

para os gases (hidrocarbonetos),

$$\frac{d(m_{g,vs})}{dt} = \dot{m}_{g,x} - \dot{m}_{g,f}$$
⁽¹⁹⁾

e para o vapor

$$\frac{d(m_{v,vs})}{dt} = \dot{m}_{v,st} - \dot{m}_{v,f}$$
(20)

onde $\dot{m}_{c,x}$, $\dot{m}_{cq,x}$ e $\dot{m}_{g,x}$ são respectivamente as vazões de catalisador, coque e gases (hidrocarbonetos) na saída do *riser*, $\dot{m}_{v,st}$ é a vazão de vapor de *stripping*. As vazões de saída pela válvula LCV, são $\dot{m}_{c,LCV}$ para o catalisador e $\dot{m}_{cq,LCV}$ para o coque, e as vazões de saída para a fracionadora são $\dot{m}_{g,f}$ para os hidrocarbonetos e $\dot{m}_{v,f}$ para o vapor.

Temos também que:

$$\frac{dh_{vs}}{dt} = \left(\dot{m}_{c,x}cp_{c}T_{c,x} + \dot{m}_{cq,x}cp_{cq}T_{cq,x} + \dot{m}_{g,x}cp_{g}T_{g,x} + \dot{m}_{v,st}cp_{v}T_{v,st}\right) + \left(-\dot{m}_{c,LCV}cp_{c}T_{vs} - \dot{m}_{cq,LCV}cp_{cq}T_{vs} - \dot{m}_{g,f}cp_{g}T_{vs} - \dot{m}_{v,f}cp_{v}T_{vs}\right)$$
(21)

onde $T_{c,x}$ é a temperatura do catalisador, $T_{cq,x}$ é a temperatura do coque e $T_{g,x}$ é temperatura do gás, na saída do *riser* e $T_{v,st}$ é a temperatura do vapor na entrada do *stripper*.

Substituindo as equações (18), (19), (20) e (21), na equação (17), rearranjando e fazendo as simplificações necessárias, temos:

$$\frac{dT_{vs}}{dt} = \frac{\dot{m}_{c,x}cp_{c}\left(T_{c,x} - T_{vs}\right) + \dot{m}_{cq,x}cp_{cq}\left(T_{cq,x} - T_{vs}\right) + \dot{m}_{g,x}cp_{g}\left(T_{g,x} - T_{vs}\right) + \dot{m}_{v,st}cp_{v}\left(T_{v,st} - T_{vs}\right)}{m_{g,vs}cp_{g} + m_{c,vs}cp_{c} + m_{cq,vs}cp_{cq}}$$
(22)

que representa a variação da temperatura no VSS.

O calor específico do coque é obtido através da equação (23), segundo Perry *et al.* (1975) e também utilizada no trabalho de Santos (2000).

$$cp_{cq} = 0,93264 + 9,130 \cdot 10^{-4} T_{vs} - 4,0786 \cdot 10^{4} T_{vs}^{2}$$
⁽²³⁾

Sendo o calor específico do vapor obtido através da equação (24), segundo Shapiro *et al.*. (1999).

$$cp_{v} = 1,88(T_{v} - T_{ref}) - 0,14 \cdot 10^{-3}(T_{v}^{2} - T_{ref}^{2}) + 0,2 \cdot 10^{-6}(T_{v}^{3} - T_{ref}^{3}) - 0,59 \cdot 10^{-10}(T_{v}^{4} - T_{ref}^{4}) + 0,71 \cdot 10^{-14}(T_{v}^{5} - T_{ref}^{5})$$

$$(24)$$

onde T_v é a temperatura do vapor T_{ref} é a temperatura de referência e cp_v é o calor específico do vapor.

Para os gases o calor específico segue a forma utilizada por Han *et al.* (2001), que estima o calor específico utilizando uma correlação modificada de Lee-Kesler (Lee e Kesler, 1998) que negligencia o efeito da pressão, típico de processos de FCC, que são operados sobre uma pressão relativamente baixa, na faixa de 200 a 300 kPa.

3.2.4 VARIAÇÃO DA PRESSÃO NO VSS

A variação da pressão no vaso separador depende da temperatura e da massa dos gases. Logo, tem-se que encontrar uma relação, que foi utilizada por Arandes *et al.* (2000), na forma molar:

$$P = P(T, \rho)$$

Na forma diferencial

$$\frac{dP_{vs}}{dt} = \left[\frac{\partial P_{vs}}{\partial T_{vs}}\right]_{\rho_{g,vs}} \frac{dT_{vs}}{dt} + \left[\frac{\partial P_{vs}}{\partial \rho_{g,vs}}\right]_{T_{vs}} \frac{d\rho_{g,vs}}{dt}$$
(25)

onde, P_{vs} é a pressão dos gases no topo do vaso separador, T_{vs} é a temperatura no VSS e $\rho_{g,vs}$ é a massa específica dos gases.

Para determinar $\left[\frac{\partial P_{_{VS}}}{\partial T_{_{VS}}}\right]_{_{PS,VS}}$ e $\left[\frac{\partial P_{_{VS}}}{\partial \rho_{_{g,VS}}}\right]_{_{TVS}}$, considera-se a carga vaporizada como

gás perfeito e utiliza-se então a equação de estado:

$$P_{vs} = \frac{\rho_{g,vs} RT_{vs}}{M_{g,vs}}$$
(26)

onde \overline{R} é a constante dos gases perfeitos, $M_{g,vs}$ é a massa molecular dos gases no VSS.

Derivando a equação (27) em relação à T_{vs} e $\rho_{g,vs}$, tem-se as seguintes equações:

$$\frac{dP_{vs}}{dT_{vs}}\Big|_{\rho_{g,vs}} = \frac{\rho_{g,vs}\overline{R}}{M_{g,vs}}$$
(27)

$$\frac{dP_{vs}}{d\rho_{g,vs}}\Big|_{T_{vs}} = \frac{T_{vs}\overline{R}}{M_{g,vs}}$$
(28)

rearranjando e substituindo as equações (27) e (28) na equação (25), temos a equação (29):

$$\frac{dP_{vs}}{dt} = \frac{\overline{R}T_{vs}}{M_{g,vs}} \left(\frac{d\rho_{g,vs}}{dt}\right) + \frac{P_{vs}}{T_{vs}}\frac{dT_{vs}}{dt}$$
(29)

que representa a variação da pressão dos gases no VSS, sendo que $\left(\frac{d\rho_{g,vs}}{dt}\right)$ é a variação da massa específica do gás com o tempo, derivada da equação (3). O

desenvolvimento da equação encontra-se no apêndice A deste trabalho, e está demonstrada na sua forma final na equação (30):

$$\left(\frac{d\rho_{g,vs}}{dt}\right) = \frac{\left(\dot{m}_{g,x} + \dot{m}_{v,st} - \dot{m}_{g,f} - \dot{m}_{c,x} \cdot \gamma\right) + \frac{1}{\rho_c} \left(\dot{m}_{c,x} - \dot{m}_{c,LCV}\right) \rho_{g,vs}}{\left(V_{vs} - \frac{m_{c,vs}}{\rho_c}\right)}$$
(30)

sendo $\left(V_{vs} - \frac{m_{c,vs}}{\rho_c}\right)$ o volume do gás no VSS e V_{vs} o volume do VSS.

A variação da pressão na base do *stripper* corresponde a pressão no topo do vaso separador mais a pressão referente ao peso do catalisador no *stripper* e é avaliada da seguinte forma:

$$P_{b,st} = P_{vs} + \rho_c g(l - \varepsilon) L_{st}$$
(31)

onde $P_{b,st}$ é a pressão na base do *stripper*, P_{vs} é a pressão no topo do vaso separador, ρ_c é a densidade do catalisador, g é a aceleração da gravidade, ε é a fração de vazios do leito de catalisador e L_{st} é a altura do leito de catalisador no *stripper*.

Até este momento definiu-se todas as equações que compõem o modelo matemático. Faz-se necessário, então, que seja estabelecido o método numérico de resolução do sistema de equações obtido. Os métodos utilizados serão discutidos no próximo capítulo.

4 TRATAMENTO NUMÉRICO

Como resultado do modelo proposto, tem-se um conjunto de 9 equações diferenciais ordinárias para: massa de gases $(m_{g,vs})$, e massa de catalisador $(m_{c,vs})$ no VSS, fração de coque na saída do *stripper* $(w_{cq,st})$, massa específica dos gases $(\rho_{g,vs})$, temperatura no VSS (T_{vs}) , pressão dos gases no topo do VSS $(P_{g,vs})$, fração de gasóleo $(y_{gol,vs})$, gasolina $(y_{gl,vs})$ e gases combustíveis $(y_{gc,vs})$ no VSS e 9 equações algébricas para: vazão (\dot{m}_i) , teor de coque catalisadoróleo (γ) , fração de vapor $(y_{v,vs})$, nível de catalisador no *stripper* (L_{st}) , porosidade no leito de catalisador no *stripper* (ε) , calor específico do coque (c_p) , do vapor e dos gases e pressão na base do *stripper* $(P_{b,vs})$.

4.1 MÉTODOLOGIA DE SOLUÇÃO

Para resolução do conjunto de equações dois métodos numéricos foram escolhidos: o método de Runge-Kutta de quarta ordem e o método de Diferenças Finitas. O método numérico é muito vantajoso devido ao fato de permitir a substituição das derivadas existentes por expressões algébricas.

O método de Runge-Kutta aplica-se a problemas de valor inicial, representado por equações diferenciais ordinárias. O método de Diferenças Finitas pode ser aplicado a qualquer tipo de equação diferencial, ordinária ou parcial. Após a aplicação do método, o problema se resume à solução de um conjunto de equações algébricas.

Abaixo é feita uma descrição dos métodos numéricos utilizados.

4.2 MÉTODO DE RUNGE-KUTTA

O método de Runge-Kutta de quarta ordem combina em um intervalo, informações de vários passos do método de Euler. Este método se equivale à expansão em série de Taylor (Press *et al.*. 1992), com a vantagem de não necessitar do cálculo das derivadas de ordem superior para se alcançar precisão de elevada ordem. O algoritmo possibilita encontrar erros equivalentes aos da expansão em série, apenas com o cálculo da primeira derivada da função.

A solução de problema de valor inicial considera as variações da função em um número finito de passos incrementados por uma pequena variação da variável independente. Obtém-se assim uma formulação algébrica para as mudanças na função que é dependente de passos consecutivos na variável independente. Pequenos passos de integração são requeridos para uma melhor aproximação. Considere a seguinte diferencial:

$$\frac{d\phi_i}{dt} = f_i(t, \phi_1, \phi_2, \phi_3...\phi_j) \qquad i = 1,...m.$$
(32)

onde f_i é a função conhecida, m, o número de variáveis, t, a variável independente, ϕ a variável dependente e j é o número de equações diferenciais ordinárias, sendo o algoritmo aplicado a cada uma das equações diferenciais, tendo como solução geral:

$$\phi^{t+\Delta t} = \phi^t + h f_i(t, \phi_i) \tag{33}$$

onde h é o passo de integração, $t + \Delta t$ o próximo ponto do intervalo e t o ponto com valores conhecidos. A partir de um ponto conhecido aplicando o método n vezes com diferentes incrementos nas variáveis independentes, a média dos valores encontrados é a melhor aproximação para a variável dependente. Assim a aplicação do método de Euler para n pontos implica em um erro na ordem de $(h)^{n+1}$.

Para o método de Runge-Kutta de quarta ordem tem-se:

$$\phi_i^{t+\Delta t} = \phi_i^t + \frac{k_{il}}{6} + \frac{k_{i2}}{3} + \frac{k_{i3}}{3} + \frac{k_{i4}}{6}$$

onde:

$$k_{i1} = hf_i(t, \phi_i)$$

$$k_{i2} = hf_i\left(t + \frac{h}{2}, \phi_i + \frac{k_{i1}}{2}\right)$$

$$k_{i3} = hf_i\left(t + \frac{h}{2}, \phi_i + \frac{k_{i2}}{2}\right)$$

$$k_{i4} = hf_i(t + h, \phi_i + k_{i3})$$

Necessitando-se de quatro avaliações da função f_i no intervalo $h = (t + \Delta t) - t$.

As equações do VSS formam um sistema de equações diferenciais ordinárias com 9 equações. A aplicação do método de Runge-Kutta se mostra extremamente adequado para este sistema de equações diferenciais ordinárias.

4.2.1 CRITÉRIO DE CONVERGÊNCIA

Consistência e estabilidade são condições necessárias e suficientes para a convergência, segundo Maliska (1995). Um dos requisitos fundamentais de uma aproximação numérica é que ela reproduza a equação diferencial quando os tamanhos da malha espacial e temporal tendem a zero, confirmando assim a sua consistência. A estabilidade é outra característica importante, obtida quando a solução numérica tende à solução exata das equações discretizadas. Em geral, os critérios de convergência e estabilidade são aplicados a problemas lineares, onde se consegue mostrar que uma determinada aproximação é convergente. A habilidade para se estabelecer a dimensão da malha e a magnitude do intervalo de tempo são fundamentais para o sucesso da simulação numérica. A convergência e a estabilidade da simulação numérica é então avaliada através da independência da solução em relação aos parâmetros $\Delta t e \Delta z$. Neste trabalho será avaliado somente a influência do passo de tempo, Δt . Para o método de Runge-Kutta de alta ordem aplicado a um sistema de equações diferenciais, a análise da propagação do erro é praticamente impossível, Carnahan (1990).

O método de Runge-Kutta é explícito e por isso é condicionalmente estável, necessitando de uma restrição no valor do intervalo de tempo Δt para obtenção da convergência.

4.2.2 ALGORITMO PARA O MÉTODO DE RUNGE-KUTTA

O método de Runge-Kutta é um método explícito, onde a evolução das variáveis depende de seus valores apenas no instante de tempo anterior. No algoritmo, a solução no tempo é realizada seqüencialmente. Primeiro calculase os coeficientes utilizando-se as condições iniciais e, na seqüência, resolvese as equações algébricas.

O cálculo das variáveis é ordenado como mostrado na Figura 7. O primeiro bloco representa o início do processo de resolução, logo após tem-se a entrada das condições iniciais, que são utilizadas para resolver as equações algébricas e também os coeficientes das equações. Com as condições iniciais e os coeficientes calculados, alimenta-se o conjunto de equações e tem-se início o processo de cálculo. O cálculo é interrompido quando o tempo de simulação atinge o tempo máximo estipulado. Após ter atingido o tempo máximo estipulado finaliza-se os cálculos.



Figura 7 Fluxograma do algoritmo de solução para o método de Runge-Kutta

4.3 MÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS

No método das Diferenças Finitas as derivadas existentes na equação diferencial são aproximadas utilizando-se uma expansão truncada da série de Taylor. Assim, expressa-se a equação algébrica resultante de tal aproximação em termos dos valores da função incógnita em alguns pontos específicos da malha utilizada, os pontos discretos. O número de pontos discretos está relacionado ao número de incógnitas do sistema, e intimamente ligado à precisão numérica do método. Quanto maior o número de pontos discretos, mais próxima estará a resposta numérica da solução exata das equações.

O sistema de equações algébricas formado por tal procedimento é então resolvido aplicando-se as condições de contorno do problema. Geralmente, tal esquema de aproximação mostra-se suficientemente robusto, para representar de forma adequada a equação diferencial. A vantagem na utilização de esquemas envolvendo o método das Diferenças Finitas consiste em tais esquemas serem comparativamente econômicos, em relação a outros métodos numéricos, para a montagem do sistema linear de equações algébricas resultante, devido à simplicidade das operações envolvidas.

4.3.1 DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO DIFERENCIAL ORDINÁRIA

Para o modelo proposto, formado por equações diferenciais ordinárias de primeira ordem, podemos escrever as equações da conservação da massa e energia na seguinte forma geral,

$$a_j \frac{\partial \phi_j}{\partial t} = \sum_{i=1}^n d_{i,j} \left(\phi_{i,j} - \phi_j \right) + R_j - R_{b,j}$$
(34)

onde ϕ_j representa a propriedade de interesse $(m_{c,vs}, m_{g,vs}, w_{cq,st}, y_{i,vs}, T_{vs})$, no ponto em questão, j, $\phi_{i,j}$ é o valor da propriedade em um ponto adjacente i, n indica o número de interações com o ponto de adjacente e os coeficientes a_j , $d_{i,j}$, R_j , $R_{b,j}$, são definidos de acordo com cada uma das equações de conservação. A Tabela 2 mostra os coeficientes para a equação da conservação da energia equação (22), apresentada no capítulo 3.

ϕ_{j}	$\phi_{l,j}$	$\phi_{2,j}$	$\phi_{\scriptscriptstyle 3,j}$	$\phi_{\scriptscriptstyle 4,j}$	a_{j}	$d_{I,j}$	$d_{2,j}$	$d_{3,j}$	$d_{\scriptscriptstyle 4,j}$
T _{vs}	$T_{c,x}$	$T_{g,x}$	$T_{cq,x}$	T _{v, st}	$m_{c,vs}cp_{c} + m_{g,vs}cp_{g} + m_{c,cq}cp_{cq}$	$\dot{m}_{c,x} \cdot c_{pc}$	$\dot{m}_{g,x} \cdot c_{pg}$	$\dot{m}_{cq,x} \cdot c_{pcq}$	$\dot{m}_{v,st}\cdot c_{pv}$

Tabela 2 Propriedades e coeficientes da equação da conservação da energia.

A Tabela 3 mostra os coeficientes para as equações de conservação da massa dos gases, equação (3) e catalisador, equação (4), teor de coque, equação (6) e fração dos componentes gasosos no VSS, equação (7).

	Equação (3)	Equação (4)	Equação (6)	Equação (7)
$\pmb{\phi}_{j}$	$m_{g,vs}$	$m_{c,vs}$	$W_{cq,st}$	${\mathcal Y}_{i,vs}$
$\phi_{l,j}$	-	-	W _{cq,x}	${\cal Y}_{i,x}$
$\phi_{2,j}$	-	-	-	-
a_{j}	1	1	<i>m</i> _{c,vs}	m _{g,vs}
$d_{I,j}$	-	-	<i>m</i> _{с,х}	$\dot{m}_{g,x} - rac{\dot{m}_{c,x}\gamma}{\sum\limits_{j=go,gl,gs} y_{j,x}}$
<i>d</i> _{2,j}	-	-	-	-
R_{j}	$\dot{m}_{g,x} + \dot{m}_{v,st}$	<i>m</i> _{c,x}	γ	-
$R_{b,j}$	$\dot{m}_{g,f} + \dot{m}_{c,x}\gamma$	$\dot{m}_{c,LCV}$	-	-

Tabela 3 Propriedades e coeficientes das equações de Conservação da Massa.

Para a derivada temporal uma aproximação progressiva de primeira ordem, avaliada entre os instantes de tempo $t e t + \Delta t$, pode ser empregada.

$$\frac{\partial \phi_j}{\partial t} = \frac{\phi_j^{t+\Delta t} - \phi_j^t}{\Delta t} + O(\Delta t)$$
(35)

onde Δt é o incremento no tempo, O a ordem do erro da aproximação e ϕ a propriedade de interesse. Aplicando a equação (35) na equação (34), temos:

$$a_{j}^{\theta}\phi_{j}^{t+\Delta t} - a_{j}^{\theta}\phi_{j}^{t} = \sum_{i=1}^{n} d_{i,j}^{\theta} \left(\phi_{i,j}^{\theta} - \phi_{j}^{\theta}\right) \Delta t + \left(R_{j}^{\theta} - R_{b,j}^{\theta}\right) \Delta t$$
(36)

 θ é o instante dentro do intervalo t e $t + \Delta t$, no qual o lado direito e os coeficientes da equação (37) são avaliados. Para avaliar ϕ ou os coeficientes no instante θ , utiliza-se a seguinte interpolação,:

$$\phi^{\theta} = \beta \phi^{t+\Delta t} + (1-\beta) \phi^{t} \tag{37}$$

onde β assume valores entre zero (formulação explícita) e um (formulação totalmente implícita), definindo um peso para as variáveis entre os instantes $t e t + \Delta t$.

Para a formulação explícita, $\beta = 0$ na equação (37), onde o valor da propriedade ϕ avaliada em $t + \Delta t$, dependente do seu valor e dos vizinhos no instante no tempo anterior (t). Assim, a equação (37) resulta em,

$$\phi_{j}^{t+\Delta t} = \left(1 + \frac{\Delta t}{a_{j}^{t}}d_{i,j}^{t}\right)\phi_{j}^{t} + \sum_{i=1}^{n}d_{i,j}^{t}\phi_{i,j}^{t} + \frac{\Delta t}{a_{j}^{t}}\cdot\left(R_{j}^{t} - R_{b,j}^{t}\right)$$
(38)

4.3.2 CRITÉRIO DE CONVERGÊNCIA

Para a convergência do método das Diferenças Finitas associado a uma formulação explícita, as mesmas considerações quanto a consistência e à estabilidade, mencionadas para o método de Runge-Kutta de quarta ordem, são necessárias.

4.3.3 ALGORITMO DE SOLUÇÃO

O modelo dinâmico resultou em um sistema de equações algébricas, a serem resolvidas seqüencialmente. Os cálculos dos coeficientes das equações, que estão apresentados nas Tabelas 2 e 3 são calculados através das condições iniciais e, as equações algébricas são resolvidas na seqüência.

A Figura 8 mostra a seqüência de cálculos das equações. Dado início ao processo de cálculo, tem-se no segundo bloco as condições iniciais, que serão utilizadas no bloco seguinte para calcular os coeficientes das equações que

estão apresentados nas Tabelas 2 e 3. Tendo sido realizado os cálculos dos valores dos coeficientes a serem utilizados no conjunto de equações discretizadas, passa-se agora ao quarto bloco. Inicia-se o processo de resolução do sistema de equações, realiza-se o teste para o tempo máximo de simulação estipulado, caso não tenha sido atingido retorna-se ao terceiro bloco e reinicia-se os cálculos novamente, até que se atinja o tempo máximo de simulação estipulado e encerra-se os cálculos.



Figura 8 Fluxograma do algoritmo de solução para o método de Diferenças Finitas

5 RESULTADOS

Os ensaios numéricos a serem realizados permitirão prever o comportamento das seguintes variáveis: teor de carbono no catalisador gasto na saída do *stripper*, temperatura no VSS, massa de catalisador e gases, fração dos componentes gasosos no VSS, que são gasóleo, gasolina e gás combustível, pressão no topo do VSS e na base do *stripper*, massa específica dos gases e variação no nível de catalisador no *stripper*. Para obtenção dos resultados apresentados na seção 5.4, e também na comparação com a literatura, apresentado nos itens 5.2 e 5.3, foi o utilizado o método de Runge-Kutta de quarta ordem para a solução das equações.

A Tabela 4 mostra as condições iniciais, propriedades físicas e os parâmetros geométricos utilizados nas simulações a seguir. Estes dados foram fornecidos pela SIX/Petrobras.

Condições iniciais					
Variáveis de entrada	SIX				
Vazão de gasóleo [kg/s]	$2,5.10^{-2}$				
Vazão de vapor de stripping [kg/s]	$2,0.10^{-3}$				
Vazão de catalisador [kg/s]	1,36.10 ⁻¹				
Massa de gás no VSS [kg]	2,5				
Massa de catalisador no VSS [kg]	50				
Temperatura na saída do <i>riser</i> [K]	796				
Temperatura do vapor de stripping [K]	503				
Pressão no topo do VSS [kPa]	157				
Propriedades físicas	5				
Propriedades	SIX				
Massa específica do catalisador [kg/m ³]	1400				
Massa específica do coque [kg/m ³]	-				
Esfericidade	1				
Diâmetro médio da partícula [m]	7.10^{-5}				
Calor específico do catalisador [kJ/kgK]	1,11				
Parâmetros geométricos					
Parâmetros	SIX				
Altura do vaso separador [m]	2				
Altura do stripper [m]	2,5				
Diâmetro do Vaso Separador [m]	0,5				
Diâmetro do <i>stripper</i> [m]	0,27				
Altura da LCV [m]	9				

Tabela 4 Dados para simulação – SIX/Petrobras.

5.1 TESTE DE SENSIBILIDADE PARA O INTERVALO DE TEMPO

Nesta seção serão apresentados os testes para verificar a sensibilidade da solução numérica em relação ao intervalo de tempo empregado, para os métodos de Runge-Kutta de quarta ordem e Diferenças Finitas, que a partir deste ponto serão chamados RK e DF. Os resultados consistem na simulação do modelo matemático representado pelas equações (3) a (31), descritas no capítulo 3.

A Figura 9 ilustra o comportamento da massa de gás no VSS para os dois métodos numéricos empregados, utilizando um intervalo de tempo de 6,22 s. A resposta da variável massa de gás mostra-se diferente para cada método empregado. Os dois métodos produzem fortes oscilações na fase inicial da solução, sendo que o de DF diverge e após 600 s o de RK tende a um regime permanente.



Figura 9 Massa de gás para intervalo de tempo de 6,22 s.



Figura 10 Pressão na base e topo do VSS para intervalo de tempo de 6,22 s.

A Figura 10 mostra como as pressões na base e topo do VSS variam aplicando-se um intervalo de tempo de 6,22 s. A pressão no topo do VSS segue o mesmo comportamento para ambos os métodos, estabilizando-se após um período de tempo de aproximadamente 600 minutos. Percebe-se que para os dois métodos empregados as respostas dadas pelas pressões são próximas. Como ambos os métodos de RK e DF são explícitos, o intervalo de tempo empregado na solução deverá ser menor que 6,22 s para se ter uma solução estável ao longo do tempo de processo, e sempre produzir uma solução convergente.

5.1.1 SENSIBILIDADE AO INTERVALO DE TEMPO UTILIZANDO O MÉTODO DE RUNGE KUTTA DE QUARTA ORDEM

Os resultados mostrados nas Figuras 11 a 14 se referem aos testes de sensibilidade ao intervalo de tempo aplicado ao método de RK, utilizando intervalos de tempo de 6,22, 6,19, 5,00 e 1,00 s, para a variável temperatura e

massa de catalisador e 6,19, 5,00 e 1,00 s, para massa de gás e pressão no topo.



Figura 11 Massa de gás para diferentes intervalos de tempo

Na Figura 11 tem-se o comportamento da massa de gás para intervalos de tempo de 6,19, 5,00 e 1,00 s. Quando se aplica um intervalo de tempo superior a 6,19 s e inferior a 6,22 s, observa-se um tendência semelhante a apresentada quando se usa um intervalo de 6,22 s. Pode-se ver uma leve diferença na curva para a massa de gás no VSS para um intervalo de tempo igual 6,19 s. Para intervalos de tempo de 5,00 e 1,00 não se percebe diferença significativa no comportamento da curva. Pode-se notar que utilizando um intervalo de 6,22 s, na Figura 9, também obtém-se a convergência após um período instável, no entanto, converge para um valor diferente do que o apresentado para intervalos igual ou inferior a 6,19 s. A diferença entre os valores alcançados, quando tem-se a convergência para a massa de gás no VSS é próximo de 0,025 kg. O resultado obtido para massa de gás no VSS, mostra-se semelhante para os intervalos de tempo empregados, inferiores a 5,00 s, o que permite ter liberdade para trabalhar com o maior intervalo

possível, otimizando o tempo computacional. Para a determinação do intervalo de tempo ideal, observa-se o comportamento das outras variáveis do processo, nas mesmas condições.



Figura 12 Massa de catalisador no VSS utilizando diferentes intervalos de tempo.

A Figura 12 mostra a resposta da massa de catalisador. Como pode ser visto, para intervalos de 6,22 s tem-se uma oscilação inicial, sendo que após 500 minutos a curva tende a se estabilizar. Um intervalo de 6,22 s produz resultado diferente da situação de intervalos iguais ou menores que 6,19 s. No caso, a diferença é de aproximadamente 2,5 kg de catalisador. Para intervalos menores que 6,19 s não houve mudança significativa no comportamento da curva.

A Figura 13 mostra o comportamento da temperatura no VSS para intervalos de 6,22, 6,19, 5,00 e 1,00 s. Pode-se observar que não ocorre a oscilação inicial percebida nas Figura 9 e Figura 12, para o intervalo de tempo de 6,22 s. A temperatura no VSS depende das vazões e temperatura de entrada de catalisador, gases, coque e vapor, e também da massa no VSS. As vazões e as temperaturas de entrada no VSS são condições de contorno fixas. A oscilação inicial nas massas de catalisador e gás, não causa mudança perceptível na temperatura do VSS. Observa-se que as curvas para todos os intervalos empregados apresentam a mesma tendência.



Figura 13 Temperatura no VSS utilizando diferentes intervalos de tempo.

Pode-se observar na Figura 14, o comportamento da pressão no topo do VSS, para intervalos de 6,19, 5,00 e 1,00 s. Para esta variável, tem-se uma resposta diferente para intervalos de 6,19 s, sendo que para intervalos menores, as respostas são praticamente coincidentes. Neste caso, o fator determinante para o intervalo de tempo a ser utilizado nas simulações, será a resposta oferecida pela pressão no topo do VSS. Neste caso, a independência do resultado em relação ao intervalo de tempo ocorre para intervalos menores ou iguais a 5,00 s.



Figura 14 Pressão dos gases no topo do VSS utilizando diferentes Δt .

A pressão no topo depende da massa de gases e da temperatura. Como a temperatura não se altera, a variação da pressão é somente função da massa de gases. Na base do VSS a pressão segue o mesmo comportamento da pressão no topo. A diferença de pressão entre o topo e a base é de aproximadamente 8,5 kPa

5.1.2 SENSIBILIDADE AO INTERVALO DE TEMPO UTILIZANDO O MÉTODO DE DIFERENÇAS FINITAS

Os resultados obtidos para os testes de sensibilidade ao intervalo de tempo para o método de DF, mostram-se próximos aos resultados fornecidos para o método de RK, o que pode ser comprovado quando se observa as Figura 15 e Figura 16. Pode-se perceber que o resultado obtido para a massa de gás mostrada na Figura 15 e para massa de catalisador na Figura 16, quando se utiliza o método de DF, segue a mesma tendência dos resultados obtidos através do método de RK. As demais variáveis seguem a mesma tendência apresentada pela massa de gás e catalisador.



Figura 15 Massa dos gases no utilizando diferentes Δt .



Figura 16 Massa de catalisador utilizando diferentes Δt .

Os testes realizados mostraram que não há influência significativa com a mudança do intervalo de tempo para passos menores que 6,19 s, para os dois métodos empregados, sendo eles, o método de Runge-Kutta de quarta ordem e o método das Diferenças finitas. Para valores maiores de intervalo de tempo, os resultados divergem. Como 5,00 s é um intervalo de tempo que satisfaz todas as variáveis, independente do método utilizado, este será o valor empregado nas próximas simulações.

5.2 COMPARAÇÃO COM DADOS DA LITERATURA

A validação numérica do modelo proposto será feita comparando-se os resultados obtidos com os dados de Han *et al.* (2001).

As condições iniciais, propriedades físicas e parâmetros geométricos utilizados nas simulações abaixo estão apresentados na Tabela 5.

Condições iniciais					
Variáveis de entrada	Han et al. (2001)				
Vazão de gasóleo [kg/s]	49,3				
Vazão de vapor de stripping [kg/s]	1,1				
Vazão de catalisador [kg/s]	315				
Massa de gás no VSS [kg]	485				
Massa de catalisador no VSS [kg]	38000				
Temperatura na saída do <i>riser</i> [K]	787				
Temperatura do vapor [K]	430				
Pressão no topo do VSS [kPa]	230				
Propriedades físicas					
Propriedades	Han et al. (2001)				
Massa específica do catalisador [kg/m ³]	1410				
Massa específica do coque [kg/m³]	1410				
Esfericidade	0,72				
Diâmetro médio da partícula [m]	7.10^{-5}				
Calor específico do catalisador [kJ/kgK]	1,15				
Parâmetros geométricos					
Parâmetros	Han et al. (2001)				
Altura do vaso separador [m]	8,5				
Altura do Stripper [m]	6,2				
Diâmetro do Vaso Separador [m]	5,1				
Diâmetro do Stripper [m]	3,2				
Altura da LCV [m]	10,5				

Tabela 5 Dados para simulação – Han et al. (2001).

5.2.1 COMPARAÇÃO DO COMPARTAMENTO DINÂMICO DO MODELO COM A LITERATURA

As figuras abaixo representam o comportamento das variáveis, quando se aplica após 10 minutos de simulação um aumento de 5% na vazão de gasóleo, voltando posteriormente após 140 minutos ao estágio inicial, sendo aplicado em seguida após 150 minutos uma diminuição em 5% da vazão de gasóleo. O intervalo de tempo empregado para a simulação foi de 400 minutos, com um intervalo de tempo de 5 s.



Figura 17 Massa de catalisador no VSS.

Na Figura 17 são mostradas as curvas do modelo proposto e a de Han *et al.* (2001) para a massa de catalisador. Apesar de apresentarem comportamento semelhante, a magnitude dos resultados é bastante diferente. Como o modelo proposto está sendo resolvido de forma estática, sendo dependente de condições de contorno fixas do *riser*, enquanto o modelo da literatura se refere a um modelo dinâmico em que as condições de contorno variam com o tempo, a influência sofrida pela mudança de alguns parâmetros que variam com o tempo no *riser* não são percebidas quando ocorre a

simulação do VSS de forma isolada, como é o caso tratado neste trabalho. Para o caso da variação da massa de catalisador no VSS, a diferença entre os valores obtidos ocorre devido à pressão dos gases no topo, que não sofre o aumento esperado. A válvula que determina a vazão de catalisador gasto depende do diferencial de pressão entre o VSS e o regenerador. Como este não apresenta alteração significativa a vazão de saída de catalisador gasto será menor do que a vazão apresentada no modelo comparado, fazendo assim com que a massa de catalisador no VSS sofra pouca alteração em relação ao modelo da literatura.



Figura 18 Pressão na base e no topo do VSS.

A pressão no topo e na base do VSS são mostradas na Figura 18. Como no caso anterior, a resposta apresenta a mesma tendência, mas não atinge o valor do resultado apresentado na literatura. Para o caso escolhido para comparação, onde se tem alteração na vazão de alimentação na entrada do *riser*, as condições de entrada do VSS são alteradas devido aos parâmetros que variam com as reações químicas ocorridas e sobre os quais não se tem controle. As alterações ocorridas devido às reações químicas no *riser* que influenciam na pressão dos gases no VSS, são a variação da temperatura e
também e da fração dos componentes gasosos que alteram neste caso a massa molecular dos gases no VSS.



Figura 19 Temperatura no VSS.

A Figura 19 ilustra as curvas de temperatura para o modelo e Han *et al.* (2001). O resultado para o modelo mostra uma variação pequena, comparada com o modelo da literatura. Um decréscimo na temperatura na saída do *riser*, conseqüentemente causa também uma diminuição da temperatura de entrada no VSS. A causa da diminuição da temperatura do *riser* ocorre em função do aumento do consumo de calor para vaporizar a carga de gasóleo e também devido ao caráter endotérmico das reações. O modelo da literatura não fornece o novo valor alcançado pela temperatura de saída do *riser*.

A vazão de catalisador mostrada na Figura 20 apresenta uma variação menor do que a apresentada na literatura, sendo talvez esta a razão da distância entre os valores esperados e os encontrados pelo modelo.



Figura 20 Vazão de catalisador gasto na saída do stripper.

Observa-se que as respostas têm a mesma tendência, no entanto, os valores alcançados pelas variáveis após terem sido aplicado os mesmos degraus não são iguais. Possivelmente pelo modelo de conversor utilizado, e também o fato de se estar comparando apenas o VSS e não a conversor como um todo. A influência causada na temperatura, por exemplo, devido às reações químicas que influenciam na temperatura de saída do *riser* não são reproduzidas, já que esta é uma condição de contorno fixa. A queda da temperatura resulta em um considerável decréscimo na conversão de gasóleo no *riser* e um aumento na formação de coque. As frações dos componentes gasosos na entrada do VSS também se alteram após a alteração na entrada da carga de alimentação, porém, não são fornecidas pelo modelo da literatura. Sendo assim, não se pode avaliar precisamente a sua influência no modelo proposto.

5.2.2 COMPARAÇÃO DO MODELO PROPOSTO COM A LITERATURA EM REGIME ESTACIONÁRIO

A comparação do modelo proposto com o modelo de Han *et al.* (2001), encontra-se na Tabela 6. Os resultados apresentados referem-se a dados obtidos para o regime estacionário.

O resultado obtido com o modelo está bem próximo do valor da literatura para a pressão no topo e pressão na base. Observa-se que a temperatura e o teor de coque mostram-se um pouco acima do apresentado no modelo de Han *et al.* (2001). Como podemos observar na Figura 20 da seção 5.2.1, a vazão de catalisador encontra-se acima do valor obtido na literatura, isto mostra que não obteve-se um ajuste satisfatório para a vazão de catalisador, sendo que o mesmo ocorreu para com a vazão de gás para a fracionadora. Em vista disto as massas de gás e catalisador mostraram-se menores, este fato deve ter repercutido na temperatura, pois é dependente da massa de catalisador e gás e no teor de coque, que depende da massa de catalisador.

Variáveis	Modelo	Han et al. (2001)	Unidades
Pressão no topo.	230,56	230	kPa
Pressão na base.	254,93	254,54	kPa
Massa de catalisador no VSS.	37983	38000	kg
Temperatura.	790,61	787	K
Teor de coque.	0,01	0,009	kg _{coque} /kg _c

Tabela 6 Comparação do modelo com dados do modelo de Han et al. (2001).

5.3 COMPARAÇÃO COM DADOS EXPERIMENTAIS

A comparação com os resultados da unidade piloto da SIX/Petrobras será apresentada nesta seção. Os resultados do modelo são comparados com valores experimentais em regime estacionário da unidade piloto. Os dados do modelo e os fornecidos pela planta estão apresentados na Tabela 7.

O resultado obtido com o modelo está bem próximo do valor da planta para a pressão no topo. Observa-se que o nível de catalisador no *stripper* está abaixo do valor da planta. Sendo as pressões na base e a montante da LCV dependentes do nível de catalisador, ressalta-se que a diferença encontrada entre os valores do modelo e da planta refletem os valores apresentados por ambas as pressões.

A temperatura apresentada pelo modelo encontra-se menor do que a temperatura da planta. Como o modelo desenvolvido não considera as perdas de calor pelas paredes, está diferença observada na temperatura deve estar relacionada ao fato do modelo ser adiabático.

Variáveis	Modelo	Planta	Unidades
Pressão no topo.	156,3	156,7	kPa
Pressão na base.	165,02	169,65	kPa
Pressão a montante da LCV.	224,36	226,53	kPa
Nível de catalisador no stripper.	1,53	1,87	m
Temperatura.	795,37	791,28	K
Teor de coque.	0,0139	0,014	kg _{coque} /kg _c

Tabela 7 Comparação do modelo com dados da SIX/Petrobras.

5.4 CASOS ESTUDADOS

As simulações dos casos abaixo foram realizadas empregando-se o intervalo de tempo de 5,00 s. Os resultados apresentados abaixo nas Figuras 20 a 31 foram obtidos, após a realização de três testes, a saber: sendo imposto para cada teste a mudança de algumas variáveis de entrada.

- Caso 1 implica uma mudança na vazão de gasóleo;
- ✓ Caso 2 uma alteração na temperatura de entrada no VSS;
- ✓ Caso 3 uma alteração na vazão de entrada de catalisador no VSS.

5.4.1 MUDANÇA NA VAZÃO DE GASÓLEO – CASO 1

Nas Figuras 21 a 24, tem-se a representação do comportamento das variáveis, quando se diminui em 5% a vazão de gasóleo após 250 minutos de simulação, e retorna-se ao estado inicial após 500 minutos.



Figura 21 Pressão dos gases e massa dos gases no VSS – Caso 1.

A Figura 21 mostra o comportamento da pressão do gás no topo e da massa de gás no VSS. Como se pode observar, após diminuir a vazão de alimentação (gasóleo), conseqüentemente diminui-se também a vazão de entrada de gases no VSS, o que provoca uma diminuição na massa de gás no VSS. Como a pressão no topo é dependente da massa específica dos gases no VSS, diminuindo-se a massa de gases diminui-se a pressão dos gases no topo do VSS.



Figura 22 Pressão na base e massa de catalisador no VSS - Caso 1.

A Figura 22 mostra o comportamento da pressão na base do VSS e também da massa de catalisador. Pode-se observar que ocorre uma queda na pressão, mas esta retorna ao estado inicial após algum tempo. Isto se deve a pressão na base ser dependente da pressão no topo, mostrado na Figura 21, e da massa de catalisador. Como a pressão no topo sofre uma queda, isto é refletido na pressão na base do VSS, mas como esta depende também da massa de catalisador, e como se observa na Figura 22, esta sofre um aumento, compensando-se assim a queda na pressão.

A resposta da temperatura e do nível de catalisador podem ser acompanhados na Figura 23. Pode-se observar que a temperatura sofre pouca influência com a variação da vazão de gasóleo. No entanto, deve-se observar que este aumento deve ser maior do que o apresentado na figura, em referência aos comentários feitos anteriormente na seção 5.2.1. O nível de catalisador aumenta devido a sua dependência da massa de catalisador, pois como a massa de catalisador aumenta tem-se um aumento no nível de catalisador.



Figura 23 Nível de catalisador e temperatura – Caso 1.

A Figura 24 mostra como as vazões de saída do gás para a fracionadora e a vazão de saída de catalisador gasto para o regenerador se comportam, quando diminui-se a vazão de gasóleo. Pode-se perceber que a vazão de catalisador diminui, mas retorna ao seu estado inicial estabilizando-se novamente. A vazão de catalisador é dependente do diferencial de pressão entre o VSS e o regenerador, portanto, vê-se que a vazão de catalisador gasto na saída do VSS acompanha a tendência ocorrida com a pressão na base. A vazão de gás é dependente do diferencial de pressão do gás no topo do VSS e a fracionadora. Observa-se que a vazão de saída dos gases sofre um queda estabilizando-se em outro patamar. Como a pressão dos gases no VSS diminui, o mesmo ocorre com a vazão.



Figura 24 Vazões de saída de gás e catalisador gasto no VSS – Caso 1.

5.4.2 MUDANÇA NA TEMPERATURA DE ENTRADA NO VSS – CASO 2

As Figuras 25 a 27, mostram a resposta dinâmica para uma diminuição na temperatura de entrada no vaso separador em 80 K, após 250 minutos de simulação, voltando posteriormente, após 500 minutos ao seu estado inicial, correspondendo ao Caso 2.

Uma diminuição na temperatura de entrada causa um aumento na massa de gás, como pode ser visto na Figura 25. Isto ocorre, porque a pressão é dependente da temperatura, e a alteração sofrida pela pressão, provocada pela diminuição da temperatura, influencia diretamente a vazão de gases para a fracionadora. Sendo as vazões dependentes do diferencial de pressão, uma diminuição na vazão de saída dos gases acaba causando um pequeno aumento na massa de gás no VSS.



Figura 25 Massa de gás e pressão na base do VSS - Caso 2.



Figura 26 Massa de catalisador e pressão no topo - Caso 2.

A Figura 26 mostra o comportamento da massa de catalisador e da pressão na base do VSS. A pressão no topo sofre somente uma pequena alteração, voltando novamente ao seu estado inicial, sendo que esta alteração não é sentida pela pressão na base do VSS. Além disso, a vazão de catalisador também não se altera, ou seja, a massa de catalisador no VSS permanece inalterada.



Figura 27 Nível de catalisador e temperatura – Caso 2.

O nível de catalisador e a temperatura no VSS têm seus comportamentos mostrados na Figura 27. Observa-se que o nível de catalisador não se altera, visto que é dependente da massa de catalisador. Como visto anteriormente na Figura 21 esta não sofre variação. A temperatura no VSS sofre uma pequena queda, quando da diminuição da temperatura de entrada das vazões de catalisador, coque e gases no VSS.

5.4.3 MUDANÇA NA VAZÃO DE ENTRADA DE CATALISADOR GASTO NO VSS – CASO 3

As Figuras 28 a 31 referem-se ao Caso 3, onde se tem uma variação de 5% na vazão de entrada de catalisador, após 250 minutos voltando em seguida ao estado inicial, passados 500 minutos.



Figura 28 Pressão na base e massa de gás no VSS - Caso 3.

A Figura 28 mostra o comportamento da pressão na base do VSS e a massa de gases. Observa-se um aumento na massa de gases, o que provoca também um aumento da pressão dos gases. A pressão na base do VSS diminui, mesmo com o aumento da pressão no topo. Esta queda ocorrida na pressão na base se deve ao fato desta ser dependente da massa de catalisador. Quando diminui-se a vazão de entrada, observa-se que a massa de catalisador no VSS diminui. Como a queda sofrida pela massa de catalisador é mais significativa do que o aumento da pressão dos gases, tem-se como resultado uma queda na pressão na base.



Figura 29 Pressão no topo e massa de catalisador – Caso 3.

A massa de catalisador e a pressão dos gases no VSS são mostradas na Figura 29. Vê-se que a pressão dos gases sofre um aumento, devido ao aumento na massa de gases. A massa de catalisador diminui, quando se tem uma diminuição da vazão de entrada de catalisador.

A Figura 30 mostra o nível de catalisador no VSS e a temperatura. Observa-se que o nível de catalisador diminui, o que já era esperado, pois há uma diminuição na massa de catalisador no VSS. Na temperatura tem-se uma pequena queda.

A vazão de saída do catalisador gasto ilustrada na Figura 31, sofre uma queda, que acompanha a queda na vazão de entrada. A vazão de saída de gases para a fracionadora aumenta devido ao aumento ocorrido na pressão dos gases.



Figura 30 Temperatura e nível de catalisador no VSS - Caso 3.



Figura 31 Vazões de saída do gás e catalisador gasto - Caso 3.

Neste capítulo foram apresentados os resultados para os testes de sensibilidade do intervalo de tempo empregado, e para os casos estudados, bem como as comparações realizadas entre o modelo e os dados de uma planta multi-propósito e também com dados da literatura. Estes resultados permitiram chegar a algumas conclusões que serão apresentadas no próximo capítulo, bem como sugestões, que possam contribuir para o enriquecimento do trabalho.

6 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Neste trabalho foi apresentado um modelo dinâmico para o VSS de uma unidade de craqueamento catalítico, elaborado com base nos princípios de conservação da massa e energia. O modelo procura englobar todos os parâmetros significativos do processo de separação e retificação que ocorrem no VSS além de particularidades apresentadas em trabalhos da literatura.

Esse modelo permite o monitoramento de várias variáveis de entrada, permitindo prever o seu comportamento previamente e utilizar esse conhecimento para controle do processo.

Em comparação com os resultados do modelo dinâmico de Han *et al.* (2001), o modelo apresentou as mesmas tendências, no entanto não alcançou os mesmos valores fornecidos. O modelo da literatura em questão trata do conversor como um todo, *riser*-VSS-regenerador, portanto, todas as condições de contorno variam e no modelo proposto as condições de contorno são fixas.

A comparação dos resultados do modelo proposto com dados de operação de uma planta industrial e com o modelo de Han *et al.* (2001), em regime estacionário mostrou ótima concordância.

Como teste para o modelo, foram propostos três casos de estudo, sendo no caso 1 uma mudança na vazão de gasóleo, no caso 2 uma mudança na temperatura na saída do *riser* e no caso três uma mudança na vazão de catalisador na entrada do VSS. Para os três casos estudados as respostas apresentadas pelo modelo proposto mostraram-se de acordo com o esperado.

O modelo proposto mostra-se adequado, pois:

✓ O modelo se mostra coerente com resultados da literatura;

 Os resultados do modelo mostraram boa concordância com resultados experimentais em regime estacionário;

- ✓ As soluções apresentadas mostram-se coerente com o problema físico;
- ✓ As metodologias de solução (Runge-Kutta e Diferenças Finitas) são semelhantes entre si;
- ✓ Os dois métodos mostram-se igualmente adequados à aplicação em controladores, pois mesmo sendo métodos explícitos permitiram utilizar um passo de tempo que não comprometeu de forma significativa o tempo computacional. Na simulação dos Casos 1, 2 e 3, utilizando um intervalo de tempo de 5,00 s, em um computador Pentium III, de 1 GHz e 1 Gb de memória RAM, o tempo computacional para 1000 minutos de simulação foi de 59 s para o método de RK e de 55 s para o método de DF. Para todas as simulações foi utilizado o mesmo computador.

6.1 TRABALHOS FUTUROS

Como sugestão para trabalhos futuros, no que se refere ao modelo apresentado, temos:

- Obter uma equação para avaliar o teor de coque catalisador-óleo com dados experimentais, visto que a equação utilizada no modelo é uma equação empírica e depende da geometria do equipamento e também das condições de operação. Para obter-se um resultado mais realista da eficiência do equipamento, a obtenção de uma equação específica seria necessário;
- Resolver o conjunto de equações utilizando o método de Diferenças Finitas na forma totalmente implícita. A utilização de Diferenças Finitas com a formulação totalmente implícita entre os métodos de solução empregados, é de fundamental importância quando do emprego desse modelo matemático integrado a um sistema de controle de toda planta de FCC, pois a formulação totalmente implícita é incondicionalmente estável, reduzindo o tempo computacional de simulação, o que é fundamental para a rápida atuação do sistema de controle na correção do funcionamento da planta.

- ✓ Como o tempo de processamento dos dados é de fundamental importância para o emprego no controle da planta, sugere-se a solução do sistema de equações não-linear e acoplado pelo método de Newton.
- ✓ Avaliar as possíveis reações químicas que ocorrem no VSS, pois em trabalho realizado por Baptista *et al.* (2002), o elevado rendimento de gás combustível rico em hidrogênio, obtido nas amostragens feitas no fundo do retificador, evidenciaram que reações de desalquilação e condensação continuam ocorrendo no retificador;
- ✓ Avaliar o vaso separador e *stripper* separadamente;
- ✓ Utilizar um modelo de leito fluidizado para aproximar adequadamente a hidrodinâmica do *stripper*, associado a uma solução usando DFC.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABADIE, E., Craqueamento Catalítico, Petrobras, SEREC/CEN-SUD, 1997.

- ALI, H.; ROHANI, S., "Dynamic Modeling and Simulation of a *Riser*-Type Fluid Catalytic Cracking Unit", Chem. Eng. Technol., v. 20, p. 118-130, 1997.
- ARBEL, A.; RINARD, I. H.; SHINNAR, R., "Dynamic and Control of Fluidized Catalytic Crackers. Part 2: Multiple Steady States and Instabilities", Ind. Eng. Chem. Res., v. 34, p. 3014-3026, 1995b.
- ARANDES, J. M.; AZKOITI, M. J.; BILBAO, J.; DE LASA, H. I., "Modelling FCC Units Under Steady and Unsteady State Conditions", The Can. Journal of Chem. Eng., v. 78, p. 111-123, 2000.
- BAPTISTA, C. M. L. A.; CERQUEIRA, H. S.; MOREIRA, E. M.; MANSUR,
 A. L., "Diagnóstico do Retificador da Unidade de FCC da REMAN",
 Boletim Técnico da Petrobras, v. 45, p. 284-293, 2002.
- CARNAHAN, B., Applied Numerical Methods, Krieger Publishing Company, Melbourne, FL., 1990, 624 p.
- FABRICA CARIOCA DE CATALISADORES (FCC EN REVISTA), Rio de Janeiro: SESET, n° 29, Ano VIII, Outubro de 2001.
- HAN, I. S.; CHUNG, C. B., "Dynamic Modeling and Simulation of a Fluidized Catalytic Cracking Process. Part I: Process modeling", Chem.
 Eng. Science, v. 56, p. 1951-1971, 2001.
- HAN, I. S.; CHUNG, C. B., "Dynamic Modeling and Simulation of a Fluidized Catalytic Cracking Process. Part II: Property Estimation and Simulation", Chem. Eng. Science, v. 56, p. 1973-1990, 2001.

- MALAY P.; MILNE B. J.; ROHANI S., "The Modified Dynamic of a *Riser* Type Fluid Catalytic Unit", **The Canadian J. of Chem. Eng.**, v. 77, p. 169-179, 1999.
- MALYSKA, C. R., Transfêrencia de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional, Livros Técnicos e Científicos, 1995, p. 424.
- McKEEN, T.; PUGSLEY, T., "Simulation and Experimental Validation of a Freely Bubbling Bed of FCC Catalyst", **Powder Tecnology**, v. 129, 139-152, 2003.
- LIU, M.; LU, C.; SHI, M., "Hidrodynamic Behavior of a Gas-solid Air-loop Stripper", International Congress of Chemical and Process Engineering, 15th, 2002, Praha, Czech Republic, 11 p.
- PRESS, W. H.; VERTERLING, W. T.; TEUKOLSKY, S. A.; FLAMERY, B. P., (1992), Numerical Recipes in FORTRAN: The Art of Scientific Computating, 2^a Edição, Cambridge University Press, 1992, p.704.
- SANTOS, M. G., 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.

OBRAS CONSULTADAS

FORTUNA, A., O., Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos – Coneitos Básicos e Aplicações. Edusp- Editora da Universidade de São Paulo- São Paulo, 2000, 426 p.

HEDRICK, B. W.; KOEBEL, J. P.; CETINKAYA, I. B.; PUPALLA, K., Improved catalyst stripping from cold flow modeling, UOP LLC, USA, 1997.

- LASARIN, M. A., *Modelagem e Simulação da Seção de Conversão de uma Unidade FCC*, 1997, 147 f. Tese de Doutorado em Engenharia Química, Faculdade de Engenharia Química UNICAMP, Campinas SP.
- RALL, R. .R.; DeMULDER, B., "New Internal for Maximizing performance of FCC Catalyst Strippers", Refining Seminar, 20th, 2000, San Francisco, USA, 17 p.
- KOON, C. L.; AKBAR, F.; HUGHES, R.; TYAGI, Y. R.; DIAZ, M. C.; MARTIN, S. C.; HALL, P. J.; SNAPE, C. E., "Development of an Experimental Protocol to Evaluate Stripper Performance in Terms of Coke Yield and Composition", IChemE - v. 78, Parte a, 738-744, 2000.

APÊNDICE A

Desenvolvimento da equação da massa específica do gás

A equação que determina a massa específica do gás é derivada da equação da conservação da massa do gás,

$$\frac{dm_{g,vs}}{dt} = \dot{m}_{g,x} + \dot{m}_{v,st} - \dot{m}_{g,f} - \dot{m}_{c,x} \cdot \gamma$$

da equação da massa específica, determina-se que:

$$m_{g,vs} = \rho_{g,vs} \cdot V_{g,vs}$$

Substituindo a equação acima, na equação da conservação da massa, temos:

$$\frac{d(\rho_{g,vs} \cdot V_{g,vs})}{dt} = \dot{m}_{g,x} + \dot{m}_{v,st} - \dot{m}_{g,f} - \dot{m}_{c,x} \cdot \gamma$$

derivando o lado esquerdo da equação, utilizando a regra da cadeia, obtém-se:

$$V_{g,vs} \frac{d(\rho_{g,vs})}{dt} + \rho_{g,vs} \frac{d(V_{g,vs})}{dt} = \dot{m}_{g,x} + \dot{m}_{v,st} - \dot{m}_{g,f} - \dot{m}_{c,x} \cdot \gamma$$

onde temos que:

$$V_{g,vs} = V_{vs} - \frac{m_{c,vs}}{\rho_c}$$

Substituindo o termo que representa o volume do gás na equação,

$$V_{g,vs} \frac{d(\rho_{g,vs})}{dt} + \rho_{g,vs} \frac{d\left(V_{vs} - \frac{m_{c,vs}}{\rho_c}\right)}{dt} = \dot{m}_{g,x} + \dot{m}_{v,st} - \dot{m}_{g,f} - \dot{m}_{c,x} \cdot \gamma$$

separa-se e deriva-se o segundo termo do lado esquerdo da equação.

$$V_{g,vs}\frac{d(\rho_{g,vs})}{dt} + \rho_{g,vs}\left[\frac{dV_{vs}}{dt} - \frac{d\left(\frac{m_{c,vs}}{\rho_c}\right)}{dt}\right] = \dot{m}_{g,x} + \dot{m}_{v,st} - \dot{m}_{g,f} - \dot{m}_{c,x} \cdot \gamma$$

Utilizando novamente a regra da cadeia tem-se,

$$V_{g,vs}\frac{d(\rho_{g,vs})}{dt} + \rho_{g,vs} \cdot \frac{dV_{vs}}{dt} - \left[\frac{\rho_{g,vs}}{\rho_c}\frac{dm_{c,vs}}{dt} + \rho_{g,vs} \cdot m_{c,vs}\frac{d(1/\rho_c)}{dt}\right] = \dot{m}_{g,x} + \dot{m}_{v,st} - \dot{m}_{g,f} - \dot{m}_{c,x} \cdot \gamma$$

sendo o volume do vss e a massa específica do catalisador constantes a equação acima resume-se em:

$$V_{g,vs} \frac{d(\rho_{g,vs})}{dt} - \frac{\rho_{g,vs}}{\rho_c} \frac{dm_{c,vs}}{dt} = \dot{m}_{g,x} + \dot{m}_{v,st} - \dot{m}_{g,f} - \dot{m}_{c,x} \cdot \gamma$$

sendo que o segundo termo é representado por:

$$\frac{dm_{c,vs}}{dt} = \dot{m}_{c,x} - \dot{m}_{c,LCV}$$

substituindo, tem-se:

$$V_{g,vs} \frac{d(\rho_{g,vs})}{dt} + \frac{\rho_{g,vs}}{\rho_c} (\dot{m}_{c,x} - \dot{m}_{c,LCV}) = \dot{m}_{g,x} + \dot{m}_{v,st} - \dot{m}_{g,f} - \dot{m}_{c,x} \cdot \gamma$$

rearranjando os termos, tem-se.

$$\frac{d(\rho_{g,vs})}{dt} = \frac{\left[\left(\dot{m}_{g,x} + \dot{m}_{v,st} - \dot{m}_{g,f} - \dot{m}_{c,x} \cdot \gamma \right) + \frac{\rho_{g,vs}}{\rho_c} \left(\dot{m}_{c,x} - \dot{m}_{c,LCV} \right) \right]}{\left(V_{vs} - \frac{m_{c,vs}}{\rho_c} \right)}$$

Livros Grátis

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

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 Servico Social Baixar livros de Sociologia Baixar livros de Teologia Baixar livros de Trabalho Baixar livros de Turismo