

Validación de un modelo CFD frío para el flujo gas-sólidos en un riser del Proceso de Desintegración Catalítica, (FCC).

Ignacio Paz-Paredes^{a,b,*}, Juan G. Barbosa-Saldaña^a, Claudia C. Gutiérrez-Torres^a, José A. Jiménez-Bernal^a, y Alejandro Alonzo-García^a

^a Instituto Politécnico Nacional. SEPI-ESIME LABINTHAP, UPALM, México, D.F. C.P. 07738, México.

^b Instituto Mexicano del Petróleo. Dirección de Ingeniería de Proceso. Lázaro Cárdenas No. 152, México, D.F., C.P. 07730, México.

*E-mail: jipazpa@gmail.com

Recibido el 15 septiembre 2013; Aceptado el 28 septiembre 2013

Resumen

En el presente trabajo se valida un modelo numérico propuesto en 2D para el flujo gas-sólidos en un riser (tubo elevador) del Proceso de Desintegración Catalítica en Lecho Fluidizado (FCC). El riser tiene 0.2 m de diámetro y 14.2 m de altura y por el fondo del riser se alimenta aire de fluidización con una velocidad de 5.2 m/s, mientras que la mezcla aire-catalizador se alimenta por las entradas laterales a una velocidad de 0.476 m/s y una fracción volumétrica de 0.6. El modelo se resuelve considerando una aproximación Euleriana-Euleriana transitoria junto con la Teoría Cinética del Flujo Granular (KTGF), con el programa ANSYS® 12.0, y usando un tamaño de paso de 1 ms, para un total de 40 s de tiempo de simulación. El modelo se valida contra datos experimentales disponibles en la literatura, y se compara con resultados numéricos obtenidos por otros investigadores. Se observa que el modelo de arrastre utilizado no estima adecuadamente el intercambio de momentum gas-sólidos y sobre-predice las velocidades axiales de las fases. Los resultados numéricos obtenidos muestran una tendencia favorable con los datos experimentales, y con los resultados numéricos previos. Para mejorar la predicción de los perfiles de flujo, en una etapa posterior se utilizará un modelo de arrastre capaz de predecir la formación de grupos (clusters) de partículas.

Palabras clave: Proceso FCC, Riser, Modelo CFD.

1. Introducción

La dinámica de fluidos computacional (CFD) es una disciplina que originalmente surge para apoyar el diseño y simulación en la industria aeronáutica y automotriz, y que lentamente ha incursionado en diversos ámbitos de la ciencia y la ingeniería, siendo una de estas aplicaciones el diseño, simulación y optimización de los procesos químicos. Dentro de éstos, el proceso de desintegración catalítica en lecho fluidizado (FCC) es uno de los más importantes dentro del campo de la refinación de petróleo, debido principalmente a su alta productividad al convertir compuestos pesados del petróleo en fracciones ligeras de alto valor comercial.

El riser es el equipo donde se llevan a cabo las reacciones catalíticas que convierten las fracciones pesadas del petróleo en compuestos ligeros; poniendo en contacto una corriente de gasóleo de vacío vaporizada, con una corriente de catalizador sólido fluidizado con vapor. La mezcla gas-sólidos asciende por el riser donde se ponen en contacto las gotas de gasóleo con las partículas de catalizador, obteniéndose en lo alto los productos deseados, principalmente gasolina (figura 1).

Para realizar el diseño y optimización adecuados del riser es indispensable comprender la hidrodinámica del flujo de la mezcla gas-sólidos, ya que esta afecta la transferencia de calor, así como los rendimientos de productos. En sí, el reto de optimizar el proceso requiere de resolver el campo de flujos con transferencia de calor y disociación química lo que hace que la aplicación de la

CFD y el análisis numérico sean herramientas viables para la solución a tales problemas.

El análisis numérico del flujo gas-sólidos en el riser inicia en los primeros años de la década de los 60's del siglo pasado con el análisis de una burbuja en un lecho fluidizado [1]. Los primeros datos experimentales de un flujo gas-sólido diluido en un lecho fluidizado circulante fueron obtenidos un poco después [2], y simulados [3], para calcular la velocidad del gas y de los sólidos en una tubería vertical.

En 1995 [4] se presentó un problema tipo en la VIII Conferencia de Fluidización, a fin de comparar los diferentes modelos hidrodinámicos de los lechos fluidizados circulantes disponibles en ese momento. Estos resultados experimentales están disponibles en la literatura [5,6], [7]. En [5] se presenta la simulación de un riser en 2D con una densidad media de mado, y los resultados obtenidos se comparan de forma satisfactoria con los datos experimentales de una planta piloto. En otra investigación [6] se realiza el análisis del efecto del tamaño de malla, así como el efecto de la entrada y la salida del riser sobre los resultados computacionales, y se comparan con los datos experimentales [4]. El trabajo [6], representa una de las primeras propuestas para evaluar el efecto que tiene la geometría del riser sobre la hidrodinámica del flujo gas-sólido.

Los resultados obtenidos en el presente trabajo usando el modelo CFD propuesto se validan con los datos experimentales [4], y se comparan con los resultados numéricos obtenidos por otros investigadores [5,6], y [7].



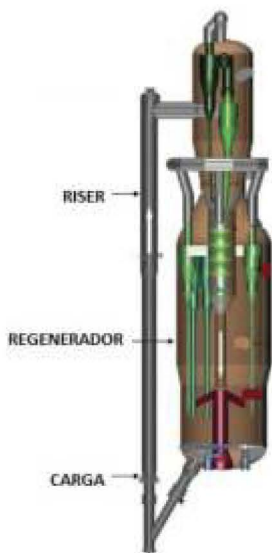


Figura 1. Esquema del proceso FCC.

El modelo propuesto debe ser capaz de reproducir el patrón de flujo núcleo-anular típico del flujo vertical gas-sólidos, así como los perfiles de los parámetros de validación: densidad de sólidos, y flux máxicos de sólidos a una determinada altura del riser, así como el perfil de la caída de presión en la coordenada axial del mismo.

2. Desarrollo numérico.

Para la simulación y estudio numérico de los procesos dentro del riser algunos investigadores han propuesto un modelo 2D con dos entradas laterales del catalizador para representar la configuración 3D del riser, obteniendo resultados satisfactorios. Entre estos trabajos se puede mencionar [5, 6, 8], [7], y [9], quienes validaron sus modelos numéricos con datos experimentales [4]. En [10] también se propuso un modelo 2D, el cual también se validó contra datos experimentales [11]. También se establece en base a la predicción de los coeficientes de dispersión de la fase sólida, que un modelo 2D es adecuado para representar lechos fluidizados 3D [11].

Por otra parte se realizaron estudios sobre la hidrodinámica de la transición del estado burbujeante a un estado circulante en un lecho fluidizado usando modelos 2D y 3D; estableciendo que ambos modelos predicen adecuadamente las velocidades axiales, y que el modelo 2D sobre-predice ligeramente la velocidad axial en el núcleo del flujo [12]. También se establece que para el modelo 3D fue necesario disminuir la fineza del mallado y considerar un riser de la mitad de altura del original debido a las limitaciones computacionales. Argumentan que por esta razón el modelo 3D no tiene una mejor predicción del comportamiento del lecho que el modelo 2D [12].

De lo anterior, se puede establecer que la aplicación de un modelo en 2D tiene un aceptable grado de precisión en los resultados y que los errores que se obtienen no tienen un alto impacto en la solución y sin embargo, si se

tiene un impacto favorable en cuanto a tiempo de cómputo y uso de recursos numéricos. Un modelo en 3D se acerca a un modelo real, pero se limita al uso de mallas muy espaciadas o poco finas.

Para este caso de validación se propone un modelo 2D definido como un tubo vertical cilíndrico con una diámetro de 0.20 m y un altura total de 14.2 m (figura 2). Las entradas tienen un diámetro de 0.1 m y están colocadas a ambos lados del riser a una distancia de 0.3 m del fondo; las salidas tienen un diámetro de 0.1 m y están colocadas a ambos lados del riser a una distancia de 0.3 m desde la parte superior. La idea de proponer que las entradas estén colocadas de forma simétrica a ambos lados del riser, es simular lo más cercanamente posible la instalación experimental, la cual tienen un distribuidor en el fondo que alimenta de forma homogénea la mezcla aire-catalizador.

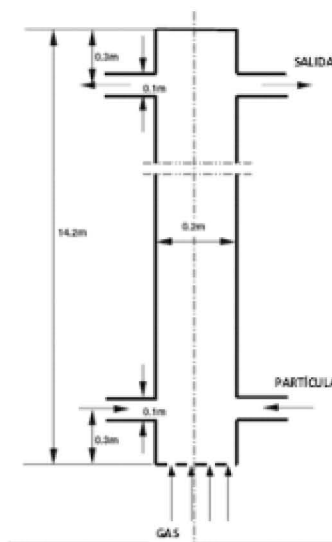


Figura 2. Diagrama esquemático del riser.

El dominio computacional consta de un mallado con 5,415 celdas. El mallado en la dirección radial es uniforme, mientras que en la dirección axial es no uniforme, teniéndose una mayor concentración de celdas en las regiones de entrada y salida del riser. Se utiliza aire como medio de fluidización, y los sólidos son partículas de catalizador de FCC con un tamaño promedio de $76 \mu\text{m}$ y una densidad de $1,720 \text{ kg/m}^3$. El aire de fluidización se alimenta en la parte baja del riser con una velocidad de 5.2 m/s, mientras que la mezcla de catalizador con aire de fluidización se alimenta por las entradas laterales a una velocidad de 0.476 m/s y con una fracción volumétrica de catalizador de 0.6. Como condición inicial se define que no hay ni aire, ni catalizador dentro del riser; como condiciones de frontera se establecen en las entradas, la velocidad y fracción volumétrica de cada fase, y a la salida se define la presión como la atmósfera normal de 101.325 kPa. La temperatura del sistema se considera constante e igual a 300K [4], [11]. (figura 3).

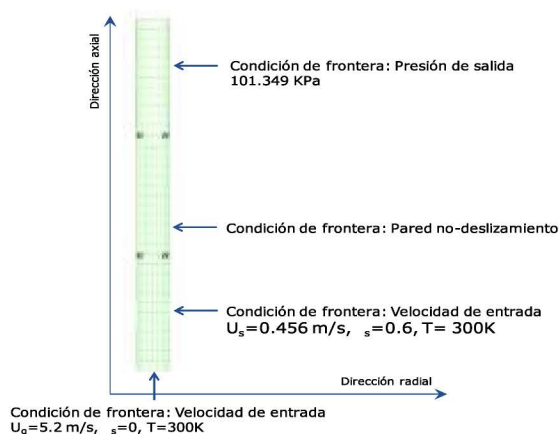


Figura 3. Dominio computacional del modelo CFD del riser.

En este estudio se utilizó un tamaño de paso en tiempo de 1 ms, el tiempo total de la simulación es de 40 s.

Las ecuaciones constitutivas usadas en este trabajo se basan en la Teoría Cinética del Flujo Granular (KTGF) [13]. La validez de esta teoría ha sido probada por diferentes autores y expuesta en diversos artículos [7], [11], [14], [15], [16], [17].

La teoría KTGF es básicamente una extensión de la teoría cinética de los gases aplicada a flujos densos gas-sólidos, describiendo las colisiones de las partículas a través de coeficientes de restitución. El movimiento aleatorio y las colisiones cuasi-elásticas de las partículas sólidas hacen que la KTGF sea ideal para describir los flujos granulares. La teoría introduce una ecuación de conservación que describe la fluctuación de la energía cinética de los sólidos denominada temperatura granular [8]. Las propiedades de los sólidos se obtienen en función del coeficiente de restitución y la temperatura granular.

En este estudio se considera que los sólidos son inelásticos, esféricos y sin rotación. El modelo se valida contra la distribución de densidad de los sólidos, la distribución de flux másico de la fase sólida en la coordenada radial medidos a una distancia axial de 3.9 m de la base del riser; y con el perfil de presión estática a lo largo de la coordenada axial [8]. Como primera aproximación se utiliza el modelo de arrastre propuesto por Syamlal y O'Brien [18].

3. Modelo matemático.

El modelo CFD propuesto en este trabajo está formado por las ecuaciones fundamentales de conservación de la materia y del momentum para cada fase, así como de las ecuaciones constitutivas o de cierre que permiten calcular los parámetros de interacción entre fases, y las propiedades de la fase sólida a través de la Teoría Cinética del Flujo Granular (KTGF) [13].

Las ecuaciones fundamentales de conservación y constitutivas del flujo granular se pueden encontrar en varios trabajos previos [5,6], [7], [11]; por lo que aquí sólo se presenta el modelo de arrastre utilizado en este trabajo [18], el cual está integrado en las librerías de ANSYS Fluent® 12.0:

El coeficiente de arrastre gas-sólidos se define como:

$$\beta_{gs} = \frac{3 \varepsilon_s \varepsilon_g \rho_g}{4 v_{r,s}^2 d_s} C_{DO} \left(\frac{Re_s}{v_{r,s}^2} \right) |v_s - v_g| \quad (1)$$

Donde:

$$C_{DO} = \left(0.63 + \frac{4.8}{\sqrt{Re_s/v_{r,s}}} \right) \quad (2)$$

Este modelo se basa en la medición de las velocidades terminales de las partículas en lechos fluidizados o fijos, con correlaciones que son función de la fracción volumétrica y del número de Reynolds relativo.

Donde es la correlación de la velocidad terminal de la fase sólida:

$$v_{r,s} = 0.5 \left(A - 0.06 Re_s + \sqrt{(0.06e)^2 + 0.12 Re_s (2B - A) + A^2} \right) \quad (3)$$

Para la cual:

$$A = \varepsilon_g^{4.14}; \text{ y } B = 0.8 \varepsilon_g^{1.28} \text{ cuando } \varepsilon_g \leq 0.85 \quad (4)$$

Ó

$$A = \varepsilon_g^{4.14} \text{ y } B = \varepsilon_g^{2.65} \text{ cuando } \varepsilon_g > 0.85 \quad (5)$$

Una vez descrito el modelo a seguir y descrita la estrategia numérica se procede a la etapa de resultados y su respectiva discusión.

4. Resultados y discusión.

El modelo CFD propuesto se valida comparando los resultados numéricos obtenidos contra datos experimentales disponibles en la literatura [4]. Los parámetros de validación son la distribución de la densidad de sólidos, y la distribución del flux másico de sólidos, ambos medidos experimentalmente a 3.9 m en la dirección axial desde el fondo del riser; así como el perfil de caída de presión a lo largo del riser [4], [11]. Estos resultados también se comparan con los obtenidos por otros investigadores [5, 6], [7]; [8].

En la figura 4 se muestran los resultados de la distribución de concentración de sólidos; que típicamente se denomina como densidad de sólidos; de la simulación actual comparado con resultados experimentales y resultados numéricos de varios investigadores que realizaron trabajos previos.

Se observa que los resultados del presente trabajo se encuentran dentro de la tendencia de los valores numéricos obtenidos en trabajos anteriores; mostrando que la densidad de sólidos es menor en el centro del riser, y la mayor densidad de sólidos se encuentra cerca de las paredes. Se ha demostrado experimentalmente que las partículas de mayor tamaño en una mezcla (como en las partículas de catalizador del proceso FCC) tienden a acumularse más que las partículas pequeñas, cerca de las paredes. Ésta pueden ser la causa de que exista una mayor densidad de sólidos en los resultados experimentales, que en los resultados numéricos de este trabajo. Adicionalmente sería recomendable mejorar las condiciones de frontera para que incluya posibles fuerzas electrostáticas en las paredes a fin de mejorar la predicción de los perfiles de velocidad [5].

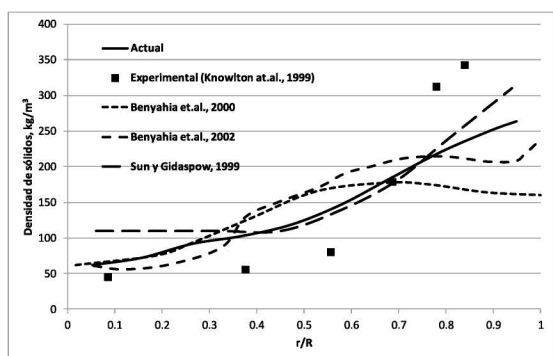


Figura 4. Distribución de densidad de sólidos, kg/m³

En la figura 5 se muestra la distribución del flux másico de sólidos, igualmente comparados con los resultados experimentales y resultados numéricos anteriores. Se puede observar que los valores del flux del presente trabajo están por encima de los resultados experimentales y de los resultados numéricos anteriores, lo cual se puede deber al modelo de arrastre usado [18], el cual no considera la formación de grupos (clusters) de partículas; y al considerar que las partículas de sólido viajan en forma independiente provocan que la transferencia de momentum del aire a los sólidos sea mayor, incrementando de esta forma su velocidad; pero sólo en el centro del riser, ya que cerca de las paredes la predicción es adecuada.

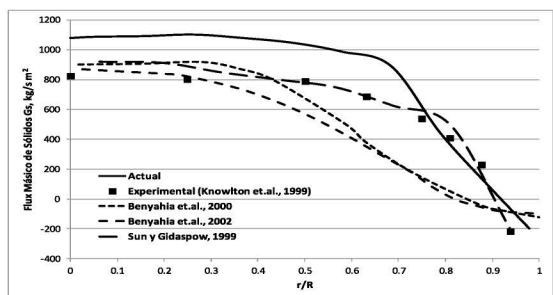


Figura 5. Distribución del flux másico de sólidos, kg/s m²

En la figura 6 se presenta la predicción actual de la caída de presión por unidad de longitud ($\Delta P/L$) en la

dirección axial, y de igual manera su comparación con los resultados experimentales, y con los resultados numéricos de dos trabajos anteriores.

La elevada caída de presión en la parte baja del riser se debe a la entrada de los sólidos; posteriormente la caída de presión disminuye hacia la parte alta del riser debido a que disminuye la densidad de sólidos [5,6]. El modelo propuesto, predice adecuadamente la tendencia de este parámetro aun cuando reporta valores menores. Esto se debe a que el modelo propuesto predice un núcleo diluido más grande que el experimental, el cual presenta menor resistencia al flujo y por lo tanto menor caída de presión.

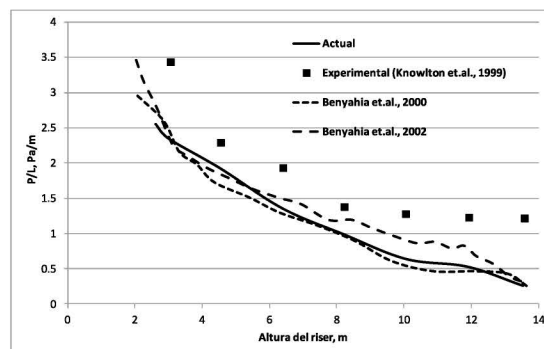


Figura 6. Caída de presión en la coordenada axial del riser, Pa/m

En la figura 7 se muestran los contornos de velocidad de los sólidos en el dominio computacional establecido. La imagen (a) muestra el perfil de velocidades en la zona inferior del riser donde se alimentan el catalizador y el aire de fluidización, la imagen (b) muestra la zona media donde se toman los datos de validación, mientras que la imagen (c) muestra la zona de salida del riser.

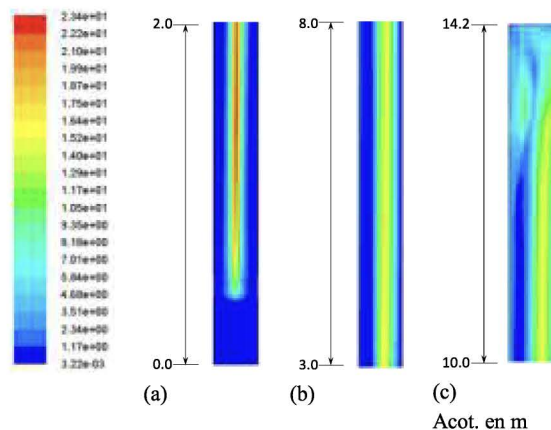


Figura 7. Perfil de velocidad de sólidos, m/s.

En la figura 8 se presenta los contornos de la fracción volumétrica de sólidos en la dirección axial del riser. La secuencia de imágenes es la misma que la descrita anteriormente para la figura 7.

En las figuras 7 y 8 se puede observar que se forma el patrón de flujo anular, típico del flujo gas-sólidos en un riser del proceso FCC: La velocidad de los sólidos es alta

en el centro del tubo mientras que su fracción volumétrica es pequeña; y lo inverso sucede en las regiones cercanas a las paredes. Esto concuerda tanto con los resultados experimentales [4], [5].

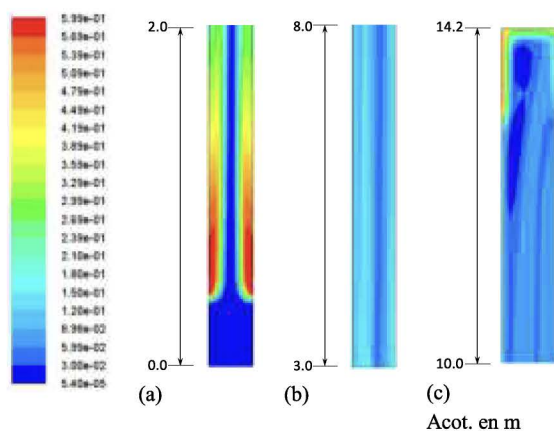


Figura 8. Perfil de fracción volumétrica de sólidos, s.

Los perfiles radial-axial de velocidad y fracción volumétrica de sólidos muestran un comportamiento ondulante, lo cual concuerda con lo observado experimentalmente, y en las soluciones numéricas [5, 6, 8], [19]. Este comportamiento ondulante se explica por la formación de grupos de partículas (clusters) cerca de las paredes en la parte alta del riser, la cuales al tener cierto tamaño descienden por la paredes debido a la gravedad. Este comportamiento se alterna de un lado a otro de las paredes, modificando así el perfil de flujo hacia la parte baja del riser.

A fin de mejorar la predicción de los datos experimentales, disminuyendo el valor de los errores cuadráticos promedio, se debe modificar el modelo actual, utilizando como modelo de arrastre el denominado: EMMS (Energy Minimization Multi-Scale) [20, 21] para simular la formación de grupos de partículas y mejorar la predicción del coeficiente de arrastre entre fases. También se deben incluir condiciones de frontera en las paredes para la velocidad tangencial de los sólidos y la temperatura granular, así como buscar mejores valores del coeficiente de especulación, y de los coeficientes de restitución, correspondientes a la Teoría Cinética del Flujo Granular (KTGF).

5. Conclusiones.

El modelo propuesto predice la formación del patrón de flujo anular típico del flujo gas-sólidos en el riser del proceso FCC.

Después de que el sistema alcanza el estado estacionario se observa que los sólidos cerca de las paredes empiezan a disminuir su velocidad, con la posibilidad de que se presente un flujo a contracorriente de sólidos, por este motivo es necesario en trabajos futuros extender el tiempo de simulación más allá de los 40 s usado en este trabajo.

La disminución de la velocidad de los sólidos y la formación de un flujo a contracorriente son la causa de que se presenten oscilaciones en el flujo gas-sólidos en la coordenada axial del riser; de acuerdo a otros trabajos, esta oscilación desaparece al aumentar la velocidad superficial del aire en el fondo del riser; esto se comprobará en algún trabajo posterior.

Se observa que el modelo actual predice un patrón de flujo que no es simétrico respecto a la coordenada radial; esto sugiere que se debe proponer un mejor modelo de arrastre, a fin de corregir esta situación.

El modelo propuesto en este trabajo se puede catalogar dentro de los modelos simples, pero que a pesar de su sencillez predice la tendencia de los datos experimentales, y concuerda con los resultados numéricos de otros investigadores.

Para mejorar el modelo propuesto, en trabajos posteriores se incluirá un modelo de arrastre con mayor rigurosidad, y se definirán condiciones de frontera más estrictas para la velocidad tangencial y la temperatura granular de los sólidos en las paredes del riser.

6. Agradecimientos.

Se agradece al Instituto Mexicano del Petróleo el haber otorgado la beca de tiempo completo para realizar los estudios de Doctorado que permiten el desarrollo del presente trabajo de investigación.

7. Referencias.

1. J. R. Davison, 1961. *Trans. Inst. Chem. Eng.* **1961**, 39, 230-232.
2. Tsuji, Y., Morikawa, Y., Shiomi, H. *J. of Fluid Mech.* **1984**, 38, 797-792.
3. Bolio, E., Yasuma, J. A., Sinclair, J.L. *AIChE J.* **1995**, 41, 6.
4. Knowlton, T., Geldart, D., Masten, J., King, D. **1995**, Presented at the Eight International Fluidization Conference. Tour, France.
5. Benyahia, S., Arastoopour, H., Knowlton, T.M., Massah, H. *Powder Tech.* **2000** 112, 24-33.
6. Benyahia, S., Arastoopour, H., Knowlton, T.M., *Chem. Eng. Comm.* **2002**, 189, 510-527.
7. Sun, B., Gidaspow, D. *Ind. Eng. Chem. Res.* **1999**, 38, 787-792.
8. Benyahia, S., Arastoopour, H., Knowlton, T. *Fluidization IX*, editado por L.S. Fan, y T.M. Knowlton. Engineering Foundation, 1998, pp 493-500.
9. Chalermisinsuwan, B., Kuchonthara, P., Piumsomboon, P. *Chem. Eng. Proc.* **2010**, 49, 1144-1160.
10. Benzarti, S., Mhiri, H., Bournot, H. *World Academy Sci. Eng. and Tech.* **2012**, 61, 1138-1143.
11. Chalermisinsuwan, B., Kuchonthara, P., Piumsomboon, P. *Chem. Eng. Proc.* **2009**, 48, 165-177.
12. Armstrong, L.M., Luo, K.H., Gu, S. *Chem Eng. J.* **2010**, 160, 239-248.
13. Gidaspow, D. *Multiphase Flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Description*. Academic Press, San Diego California, 1994.
14. Neri, A., Gidaspow, D. *AIChE J.* **2000**, 46, 52-67.
15. Hiulin, L., Gidaspow, D. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2003**, 42, 2390-2398.

16. Yunhau, Z., Huilin, L., Yurong, H., Ding, J., Lijie, Y. *Chem. Eng. J.* **2006**, 118, 1-10.
17. Andreux, R., Petit, G., Hemati, M., Simoin, O. *Chem. Eng. Process.* **2007**, 47, 463-473.
18. Syamlal, M., O'Brien T.J. *AIChE Symposium Series.* **1989**, 85, 22-31.
19. Huilin, L., Yunhua, Z., Zhiheng, S., Ding, J., Jiying, J. *Powder Tech.* **2006**, 169, 89-98.
20. Yang, N., Wang, W., Ge, W., Li, J. *Chem. Eng.* **2003**, 96, 71-80.
21. Yang, N., Wang, W., Ge, W., Li, J. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2004**, 43, 5548-5561.