

COMPARAÇÃO DE METODOLOGIAS DE SOLUÇÃO PARA UM MODELO DE REGENERADOR DE FCC

Penteado, J. C.

Laboratório de Ciências Térmicas, Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais, Centro Federal de Educação Tecnológica do Paraná, Av. Sete de Setembro, 3165, Curitiba-PR

Negrão, C. O. R.

Laboratório de Ciências Térmicas, Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais, Centro Federal de Educação Tecnológica do Paraná, Av. Sete de Setembro, 3165, Curitiba-PR
e-mail: negrao@cefetpr.br

Rossi, L. F. S.

Laboratório de Ciências Térmicas, Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais, Centro Federal de Educação Tecnológica do Paraná, Av. Sete de Setembro, 3165, Curitiba-PR
e-mail: lfrossi@cefetpr.br

Resumo. *O presente trabalho apresenta um modelo matemático para simular o comportamento dinâmico de um regenerador de unidades de craqueamento catalítico. Neste modelo, considera-se que o processo de combustão em leito fluidizado se divide em duas regiões: densa e diluída. A região densa é ainda separada em duas fases: bolha e emulsão, onde as propriedades são admitidas uniformes. Na região diluída, considera-se que as propriedades variam com a altura do regenerador. O modelo é composto por equações de conservação da massa e da energia. As equações da região densa são diferenciais ordinárias, com variação temporal, e as da região diluída diferenciais parciais, com variação espacial e temporal. As equações diferenciais são resolvidas por dois métodos numéricos: Runge-Kutta de quarta ordem e diferenças finitas. Comparações dos dois métodos indicam que ambos conduzem ao mesmo resultado. Entretanto, o método de diferenças finitas demanda um esforço computacional bem menor.*

Palavras chave: Regenerador, FCC, Modelagem Numérica

1. Introdução

O craqueamento catalítico fluido é um processo indispensável numa refinaria, sendo responsável por cerca de 85 a 90% da produção mundial de gasolina proveniente de frações pesadas do petróleo (Abadie, 1997). Como principais características do craqueamento catalítico têm-se: a) a possibilidade de ajustar a produção às necessidades reais do mercado (flexibilidade); b) o reaproveitamento de frações de baixo valor advindas de outras unidades da refinaria, tornando o processo muito rentável.

O conversor FCC (Fluid Catalytic Cracking) é composto por 3 componentes principais: o *riser* – um tubo vertical, o conjunto vaso separador/*stripper* e o regenerador. O craqueamento catalítico, propriamente dito, ocorre no *riser* e consiste na quebra de moléculas pesadas pela ação de um catalisador (particulado) a alta temperatura (500 a 700°C). A ruptura das ligações acontece com o contato rápido do catalisador que vaporiza a carga (gasóleo e/ou resíduos), possibilitando a fluidização do leito e ação seletiva do catalisador (promoção das reações de craqueamento). Neste processo, ocorre a formação de compostos com 3 a 12 átomos de carbono, que darão origem a produtos mais nobres. (Santos, 2000). Na sequência, os produtos são rapidamente separados do catalisador no vaso separador para interromper o processo de craqueamento. Isto reduz o sobrecraqueamento evitando a queda no rendimento dos produtos de interesse e a excessiva formação/deposição de coque na superfície do catalisador, que promove a sua desativação. Com o objetivo de restaurar a atividade do catalisador, este é continuamente retirado do vaso separador e após passar por um processo de lavagem com vapor (retificação no *stripper*) é enviado ao regenerador.

No regenerador, o coque depositado na superfície do catalisador sofre combustão transformando-se em gases. Esta queima devolve a atividade do catalisador pela liberação de sua área efetiva para reação. A combustão do coque acontece em função da alta temperatura e da presença de oxigênio injetado com ar, através do distribuidor (*pipe-grid*), localizado no fundo do vaso. A combustão do coque no regenerador tem dupla função, ambas fundamentais ao processo de craqueamento: i) a reativação do catalisador, devolvendo-lhe a sua atividade catalítica; ii) a elevação da temperatura do catalisador para que este possa retornar ao *riser* com energia suficiente para vaporizar a carga e alimentar o craqueamento. Com o retorno do catalisador regenerado ao *riser*, fecha-se o ciclo do catalisador.

A passagem do ar por entre as partículas de catalisador no regenerador causa a formação de bolhas. Forma-se então um leito fluidizado, não homogêneo, possuindo duas regiões distintas. Uma é a região densa caracterizada pela grande quantidade de sólidos e pela turbulência do leito. A segunda, acima do leito denso, é denominada região diluída, onde a fase gasosa predomina e os sólidos presentes são fruto do arraste promovido pela corrente dos gases que saem da região

densa. A separação, a coleta e o retorno do catalisador arrastado ao longo do regenerador são feitos através de ciclones que devolvem o catalisador diretamente ao interior da região densa.

O presente trabalho apresenta um modelo matemático com o objetivo de simular o comportamento dinâmico do regenerador de uma unidade de craqueamento catalítico. Neste modelo, considera-se que o processo de combustão em leito fluidizado se divide em duas regiões: densa e diluída. A região densa é ainda dividida em duas fases: bolha e emulsão, onde as propriedades são admitidas uniformes. Na região diluída, considera-se que as propriedades variam com a altura do regenerador. O modelo é composto por equações de conservação da massa e da energia. As equações da região densa são diferenciais ordinárias, com variação temporal, e as da região diluída diferenciais parciais, com variação espacial e temporal. As equações diferenciais são resolvidas por dois métodos numérico: Runge-Kutta de quarta ordem e diferenças finitas.

2. Modelo Matemático

Neste trabalho faz-se um tratamento separado das regiões densa e diluída (Fig. 1). A região densa é composta de duas fases: bolha e emulsão, com propriedades uniformes em cada uma delas. Na região diluída, por sua vez, as propriedades variam com a altura. O modelo proposto possui as seguintes características: i) a fase emulsão está na condição de mínima fluidização; ii) a fase bolha não contém sólidos; iii) as fases bolha e emulsão trocam calor e massa entre si; iv) a maior parte da combustão acontece na fase emulsão; v) o gás efluente do regenerador é composto por CO, CO₂, O₂, H₂O e N₂; vi) a queima do hidrogênio é considerada instantânea; vii) a razão de hidrogênio e carbono é constante durante a queima do coque; viii) os ciclones possuem eficiência de 100%; ix) o calor específico do catalisador é assumido constante para a faixa de temperatura em que se trabalha; x) o calor específico dos gases varia com a temperatura; xii) sólidos e gases na fase emulsão estão em equilíbrio térmico. A descrição completa do modelo pode ser encontrada em Penteadó (2003).

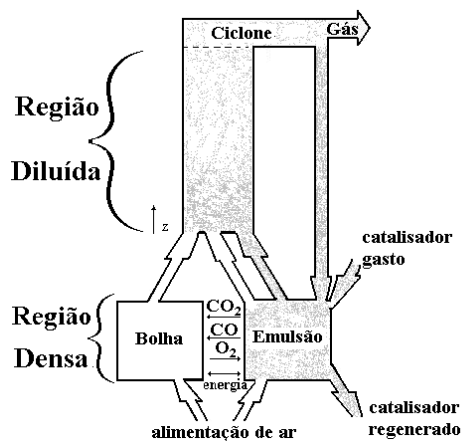


Figura 1 – Esquema da modelagem do regenerador.

2.1. Região Densa

A região densa é formada pela: i) fase emulsão, constituída por gases e catalisador em mínima fluidização; ii) e fase bolha, composta pelo excesso de ar necessário à mínima fluidização.

2.1.1. Fase Emulsão

Esta fase é considerada uniforme, composta por sólidos (catalisador e coque) fluidizados pelo ar de alimentação (O₂ e N₂) e por gases formados na combustão (CO, CO₂ e H₂O). A fração de vazios do leito em mínima fluidização foi determinada utilizando uma correlação semelhante à utilizada por Santos (2000). O cálculo da velocidade de mínima fluidização utiliza a equação de Ergun na forma adimensional apresentada por Kunii e Levenspiel (1996).

Conservação da massa de sólidos: A aplicação de um balanço de massa para o catalisador na região densa contempla as correntes mostradas na Fig. 1:

$$\frac{dm_{c,E}}{dt} = \dot{m}_{c,G} + \dot{m}_{c,CL} - \dot{m}_{c,R} - \dot{m}_{c,F} \quad (1)$$

onde m é a massa no volume de controle e \dot{m} é a vazão mássica. Os índices c , G , CL , R e F indicam, respectivamente, catalisador, gasto, retorno dos ciclones, regenerado e região diluída. O balanço de massa de coque resulta em:

$$m_{c,E} \frac{d(w_E)}{dt} = (w_G - w_E) \dot{m}_{c,G} + (w_{CL} - w_E) \dot{m}_{c,CL} - r_{cq,E}'' M_{cq} V_E \quad (2)$$

onde w é o teor de coque, r'' é a taxa de consumo ou geração de uma propriedade por unidade de volume, M é a massa molecular e V , o volume. Os índices E e cg representam, respectivamente, a fase emulsão e o coque.

Conservação da massa de gases: A conservação de cada componente dos gases na fase emulsão é escrita como:

$$\frac{dC_{i,E}}{dt} = \frac{v_{g,E}}{L_D} (C_{i,AR} - C_{i,E}) + \frac{D_{BE} \delta}{\varepsilon_{mf} (1 - \delta)} (C_{i,B} - C_{i,E}) + \frac{r_{i,E}''}{\varepsilon_{mf}} \quad (3)$$

onde C é a concentração, D é o coeficiente de transferência de massa, L , altura, ε_{mf} , a fração de vazios de mínima fluidização, δ , a fração do volume ocupado pela fase bolha e v_g , a velocidade do gás. O índice i representa os diferentes componentes: O_2 , CO , CO_2 , H_2O , N_2 e os índices AR , B e D indicam, respectivamente, o ar de alimentação, a fase bolha e a região densa.

Conservação da energia: A aplicação do balanço de energia na fase emulsão proporciona:

$$\begin{aligned} (m_{c,E} c_{pc} + m_{g,E} c_{pg,E}) \frac{dT_E}{dt} = \sum -\Delta H_{r,E} V_E + \dot{m}_{c,G} c_{pc} (T_G - T_E) + \dot{m}_{c,CL} c_{pc} (T_{CL} - T_E) \\ + \dot{m}_{AR} c_{pg,E} \left(\frac{c_{p,AR}}{c_{pg,E}} T_{AR} - T_E \right) + V_B \left[H_{BE} + D_{BE} (C_{O_2,B} - C_{O_2,E}) c_{p,O_2} \right] (T_B - T_E) + U_V A_V (T_V - T_E) \end{aligned} \quad (4)$$

onde T é a temperatura, c_p , o calor específico, U é o coeficiente global de troca térmica, A , a área de troca de calor, ΔH_r , a entalpia de reação, definida como a diferença entre a entalpia dos produtos e dos reagentes, H é o coeficiente de transferência de calor por unidade de volume. Os índice g e V significam, respectivamente, gás e vizinhança.

2.1.2. Fase Bolha

A fase bolha é formada somente por gases onde ocorre a oxidação de CO em CO_2 . A conservação de cada espécie é dada por:

$$\frac{dC_{i,B}}{dt} = \frac{v_{g,B}}{L_E} (C_{i,AR} - C_{i,B}) - D_{BE} (C_{i,B} - C_{i,E}) + r_{i,B}'' \quad (5)$$

O balanço de energia na fase bolha proporciona:

$$\begin{aligned} m_{g,B} c_{pg,B} \frac{dT_B}{dt} = \sum -\Delta H_{r,B} V_B + \dot{m}_{i,AR,B} c_{pg,B} \left(\frac{c_{p,AR}}{c_{pg,B}} T_{AR} - T_B \right) \\ \left[H_{BE} V_B + \sum D_{BE} V_B (C_{i,E} - C_{i,B}) c_{pi} \right] (T_E - T_B) \end{aligned} \quad (6)$$

2.2. Região Diluída

O escoamento na região diluída é considerado unidimensional. A variação de cada componente e a temperatura são previstas em função da altura, a partir do nível da fase densa. O modelo prevê a queima de coque na superfície do catalisador arrastado para os ciclones e oxidação de CO em CO_2 na fase gasosa. A quantidade de catalisador presente na região diluída decai exponencialmente com a altura do leito sendo sua fração de volume calculada pela equação empírica utilizada por Kunii e Levenspiel (1996).

Conservação da massa: A equação da conservação de coque pode ser escrita como:

$$\frac{\partial(w_F)}{\partial t} + \frac{v_{cF}}{\varepsilon_{cF}} \frac{\partial(w_F)}{\partial z} = r_{cq,F}^m \quad (7)$$

onde ε é a fração de volume e v_c , a velocidade do catalisador. A conservação das espécies na fase gasosa assume a forma:

$$\frac{\partial(C_{i,F})}{\partial t} + \frac{v_{g,F}}{\varepsilon_{gF}} \frac{\partial(C_{i,F})}{\partial z} + \frac{C_{i,F}}{\varepsilon_{gF}} \frac{\partial(v_{g,F})}{\partial z} = r_{i,F}^m \quad (8)$$

Conservação da energia: A equação diferencial parcial resultante será:

$$(\rho_c c_{pc} \varepsilon_{c,F} + \rho_{g,F} c_{pg,F} \varepsilon_{g,F}) \frac{\partial T_F}{\partial t} = -(v_{c,F} \rho_c c_{pc} + v_{g,F} \rho_{g,F} c_{pg,F}) \frac{\partial T_F}{\partial z} + \dot{Q}_{reac,F} + \dot{Q}_{los,F} \quad (9)$$

onde ρ é a massa específica, $\Delta \dot{Q}_{reac,F}$, a energia liberada no volume de controle pelas reações, $\Delta \dot{Q}_{los,F}$, a energia perdida pela parede.

2.3. Balanço de Massa Global

A massa total de catalisador no regenerador (RG) é a massa na região densa somada à massa da região diluída.

$$m_{c,RG} = m_{c,E} + m_{c,F} \quad (10)$$

A taxa de acúmulo de massa de gases no regenerador é dada em função da corrente de ar alimentada e a quantidade formada na queima do coque e a vazão de gases de exaustão:

$$\frac{dm_{g,RG}}{dt} = \dot{m}_{AR} - \dot{m}_{g,CL} + r_{g,j}^m \quad (11)$$

onde o índice j indica a região densa, D, ou diluída, F.

2.4. Pressão no Regenerador

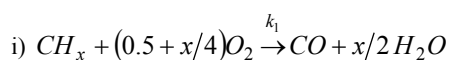
A pressão no regenerador é calculada através da seguinte relação:

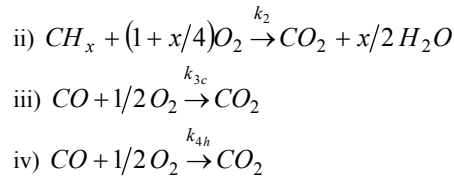
$$P_{RG} = \frac{\rho_{g,RG} R T_E}{M_{g,RG}} Z_g \quad (12)$$

onde Z é o fator de compressibilidade.

2.5. Modelo de Cinética Química

Normalmente, o coque é formado por diferentes componentes químicos (C, H, N, S). Entre estes os que predominam são carbono e hidrogênio. Portanto, neste modelo o coque será composto apenas pelo hidrocarboneto com fórmula molecular CH_x . O modelo cinético considera que o coque formado possui razão entre carbono e hidrogênio constante ($x = 0,9$), que a reação do hidrogênio é completa e instantânea e que a combustão do coque seja a etapa limitante na taxa de reação. As reações comportam-se de acordo com o modelo de Arbel *et al.* (1995) que considera a combustão do coque em duas etapas: uma formando monóxido de carbono (i) e a outra dióxido de carbono (ii). Além das reações de combustão, reações de oxidação do CO em CO_2 (iii e iv) concorrem pelo oxigênio disponível no regenerador. As reações são:





onde x é a razão de hidrogênio/carbono, k_1 , k_2 e k_{3c} são as constantes das taxas para as reações heterogêneas e k_{4h} , a constante para a reação homogênea. Nas reações de combustão, a taxa de reação é de segunda ordem e depende das concentrações de coque e de oxigênio:

$$r_1 = (1 - \varepsilon) \rho_c k_1 w y_{O_2} P_{RG} \quad (13)$$

$$r_2 = (1 - \varepsilon) \rho_c k_2 w y_{O_2} P_{RG} \quad (14)$$

onde ε é a fração de vazios e y_{O_2} é a fração molar do oxigênio. k_1 e k_2 são definidas como:

$$k_1 = \frac{\beta_c k_c}{\beta_c + 1}$$

$$k_2 = \frac{k_c}{\beta_c + 1}$$

sendo k_c e β_c definidos no modelo cinético de Arbel *et al.* (1995) como a taxa global de combustão do coque e a razão de CO/CO₂ na superfície do catalisador, respectivamente.

A oxidação do CO é definida pelo tipo de catalisador (depende dos teores de vanádio, níquel e cobre, que contribuem para a combustão total), podendo ser homogênea e/ou heterogênea. As taxas de reação de oxidação do CO (reações iii e iv) são dadas por:

$$r_3 = (1 - \varepsilon) \rho_c k_{3c} y_{O_2} y_{CO} P_{RG}^2 \quad (15)$$

$$r_4 = \varepsilon k_{4h} y_{O_2} y_{CO} P_{RG}^2 \quad (16)$$

Todas as constantes (k_c , k_{3c} e k_{4h}) de velocidade de reação dependem da temperatura e são calculadas seguindo o modelo de Arrhenius (Arbel *et al.*, 1995).

3. Metodologias de Solução

O conjunto de equações resultantes do modelo apresenta características não-lineares, principalmente devido às reações químicas, o que impossibilita a solução analítica do problema. Uma forma alternativa é utilizar métodos numéricos na solução das equações. Dois métodos são empregados para solucionar as equações: i) o de diferenças finitas (Patankar, 1980) e; ii) o de Runge-Kutta de quarta ordem (Carnahan, 1990).

O método de Runge-Kutta de quarta ordem aplica-se a problemas de valor inicial, representado por equações diferenciais ordinárias. O método das diferenças finitas, por sua vez, emprega-se tanto à solução de equações diferenciais ordinárias quanto parciais.

3.1. Método das Diferenças Finitas

3.1.1. Equações Diferenciais Ordinárias

Utilizando uma formulação completamente implícita para discretizar as equações diferenciais ordinárias da região densa (Eqs. (1) a (6) e (11)), tem-se a seguinte equação algébrica:

$$\left(\frac{a^{t+\Delta t}}{\Delta t} + \sum_{i=1}^n d_k^{t+\Delta t} \right) \phi^{t+\Delta t} = \frac{a^{t+\Delta t}}{\Delta t} \phi^t + \sum_{i=1}^n d_k^{t+\Delta t} \phi_k^{t+\Delta t} + (R^{t+\Delta t} - R_b^{t+\Delta t}) \quad (17)$$

onde ϕ representa uma propriedade de interesse ($m_{c,E}, m_{g,RG}, w_E, C_{i,E}, T_E, C_{i,B}, T_B$), ϕ_k é uma propriedade em uma região adjacente, k . n indica o número de interações com a região adjacente e os coeficientes a, d_k, R, R_b são definidos de acordo com cada uma das equações de conservação (Penteado, 2003). Note que o valor da propriedade ϕ avaliada em $t+\Delta t$, é dependente do seu valor no tempo anterior (t) e dos vizinhos no instante ($t+\Delta t$).

3.1.2. Equações Diferenciais Parciais

A discretização das equações diferenciais parciais da região diluída envolve a aproximação de duas derivadas, uma temporal e uma espacial. Adotando a formulação totalmente implícita para a discretização temporal e o esquema upwind (Patankar, 1980) para a discretização espacial, tem-se:

$$\left(\omega_P^{t+\Delta t} \frac{\Delta z}{\Delta t} + \psi_P^{t+\Delta t} \right) \phi_P^{t+\Delta t} = \left(\omega_P^{t+\Delta t} \frac{\Delta z}{\Delta t} \right) \phi_P^t + \psi_P^{t+\Delta t} \phi_S^{t+\Delta t} + \left(S_P^{t+\Delta t} - S_{b,P}^{t+\Delta t} \right) \Delta z \quad (18)$$

onde o índice P refere-se ao ponto discreto e o índice S ao ponto vizinho a montante de P. Os coeficientes ω, ψ, S e S_b são definidos de acordo com cada uma das equações de conservação (7), (8) e (9).

Note que as Eqs. (17) e (18) formam um conjunto de equações que devem ser resolvidos simultaneamente. A dependência da variável ϕ em relação aos seus vizinhos (ϕ_k e ϕ_S), aos coeficientes (a, d, ω, ψ) e aos termos fonte (R, R_b, S e S_b), no mesmo instante de tempo ($t+\Delta t$) em que está sendo avaliada, caracteriza o método como implícito e implica que as equações devem ser resolvidas iterativamente a cada passo de tempo. Um certo critério de convergência deve então ser adotado. Os valores de ϕ_P nas Eqs. (18), no entanto, são dependentes de valores a montante (ϕ_S), o que significa que a cada passo de tempo a solução pode ocorrer sequencialmente na direção do escoamento. Uma vez conhecida a condição de contorno (interface entre as regiões densa e diluída), as equações são resolvidas de baixo para cima de maneira iterativa. Desta forma, um critério de convergência deve ser estabelecido para a solução a cada passo de tempo. Como as equações da conservação da energia são as limitantes do processo (ou seja, uma vez que tais equações converjam, as demais equações já terão convergido), utilizou-se o somatório dos resíduos destas equações (tanto da região densa como diluída) como critério de convergência.

3.2. Método de Runge Kutta

3.2.1. Equações Diferenciais Ordinárias

O método de Runge-Kutta de quarta ordem (descrito em Carnahan (1990) e referenciado a partir de agora apenas como Runge-Kutta) baseia-se na solução por série de Taylor, com a vantagem de não necessitar do cálculo das derivadas de ordem superior para se alcançar precisão de elevada ordem.

O sistema com j equações diferenciais ordinárias de primeira ordem, representado pelas Eqs. (1) a (6) e (11), forma um conjunto de equações do tipo,

$$\begin{aligned} \frac{d\phi_1}{dt} &= f_1(t, \phi_1, \phi_2, \dots, \phi_j) \\ \frac{d\phi_2}{dt} &= f_2(t, \phi_1, \phi_2, \dots, \phi_j) \\ &\vdots \\ \frac{d\phi_j}{dt} &= f_j(t, \phi_1, \phi_2, \dots, \phi_j) \end{aligned} \quad (19)$$

onde o algoritmo de Runge-Kutta é aplicado simultaneamente a cada uma das equações j , em cada passo de integração. O sistema de equações tem a solução geral na forma:

$$\phi_j^{t+\Delta t} = \phi_j^t + \frac{h}{6} (k_{j1} + 2k_{j2} + 2k_{j3} + k_{j4}) \quad (20)$$

onde, $k_{j1} = h f_j(t, \phi_1^t, \phi_2^t, \dots, \phi_j^t)$,

$$k_{j_2} = h f_j \left(t + \frac{1}{2} h, \phi_1^t + \frac{1}{2} h k_{j_1}, \phi_2^t + \frac{1}{2} h k_{j_1}, \dots, \phi_n^t + \frac{1}{2} h k_{j_1} \right),$$

$$k_{j_3} = h f_j \left(t + \frac{1}{2} h, \phi_1^t + \frac{1}{2} h k_{j_2}, \phi_2^t + \frac{1}{2} h k_{j_2}, \dots, \phi_n^t + \frac{1}{2} h k_{j_2} \right),$$

$$k_{j_4} = h f_j \left(t + h, \phi_1^t + h k_{j_3}, \phi_2^t + h k_{j_3}, \dots, \phi_n^t + h k_{j_3} \right).$$

Note que as variáveis no instante de tempo futuro ($t+\Delta t$) dependem do valor de ϕ no instante de tempo anterior o que caracteriza o método como explícito. Sendo assim, não há necessidade de definir um critério de convergência para o método.

3.2.2. Equações Diferenciais Parciais

As equações diferenciais parciais (7), (8) e (9) da região diluída não podem ser resolvidas diretamente pelo método de Runge-Kutta. Estas foram então discretizadas no espaço, resultando em um conjunto de equações diferenciais ordinárias (Eqs. (19)), dependentes apenas da variável tempo. As equações podem agora ser resolvidas pelo método de Runge-Kutta. Para realizar o avanço temporal das propriedades na região diluída, precisa-se também das informações referentes à fronteira da região densa (devido à variação espacial). Uma vez que a solução da região densa depende da massa de catalisador recirculada através dos ciclones, os sistemas de equações das regiões densa e diluída são dependentes. A solução no tempo é realizada seqüencialmente, iniciando pelas equações da região densa e posteriormente avançando em cada um dos elementos infinitesimais de volume da região diluída. Ao final, resolve-se a equação de conservação da massa global.

4. Estudo de Caso

Os dados da unidade piloto da SIX/PETROBRAS localizada em São Mateus do Sul – PR, foram empregados para testar o modelo, supondo como seria a partida desta unidade.

No início do processo, considerou-se que o regenerador estava a 900K, a uma pressão de 1,9bar e fração de coque nula. As concentrações iniciais de CO, CO₂, H₂O, O₂ e N₂ são idênticas às concentrações do ar de alimentação (ver Tab. 1). No instante $t=0$, inicia-se o processo de regeneração, com as condições de contorno para as vazões de catalisador e ar, com suas respectivas frações de coque e dos gases mostradas na Tab. 1. A simulação foi realizada por um período de 200 minutos.

Todas as simulações foram realizadas em um computador Pentium III, com 1,1GHz e 512MB de memória RAM.

A seguir são mostrados resultados comparativos entre os métodos de solução para dois modelos: o primeiro, mais simplificado, envolvendo somente a região densa e o segundo tratando das duas regiões densa e diluída.

Tabela 1 - Condições de contorno e iniciais do regenerador.

Variável	Valor
Vazão de catalisador gasto (kg/s)	0,13
Temperatura do catalisador gasto (K)	790,00
Fração de coque no catalisador (kg _{coque} /kg _{cat})	0,14
Vazão mássica de ar (kg/s)	0,05
Temperatura do ar (K)	350,00
Fração molar O ₂ no ar (-)	0,20
Fração molar N ₂ no ar (-)	0,79
Fração molar CO ₂ no ar (-)	0,01
Fração molar CO no ar (-)	0,00
Fração molar H ₂ O no ar (-)	0,00

4.1. Modelo da Região Densa

O método de Runge-Kutta aplicado ao modelo da região densa tem como resultado a evolução da temperatura, a concentração de coque no catalisador regenerado e a concentração dos gases efluentes do regenerador. Duas simulações foram realizadas, uma com passo de tempo 0,54s e outra com 0,27s. Seus resultados são praticamente coincidentes. A diferença máxima observada entre as frações de coque avaliadas com os dois Δt é de apenas 0,0015%. Conclui-se que a solução é independente do Δt . O tempo computacional para 200 minutos de simulação foi de 10s para $\Delta t=0,54s$ e de 15s para $\Delta t=0,27s$.

Observou-se durante o ensaio que um avanço no tempo maior que 0,54s causava instabilidade na solução, fazendo com que o método de Runge-Kutta fosse interrompido. Acredita-se que a instabilidade esteja relacionada à dependência dos métodos explícitos em relação ao passo de tempo. Assim, considera-se para o caso estudado que o Δt máximo de 0,54s é o valor limite para a estabilidade do método.

Resolvendo o problema pelo método de diferenças finitas, dois critérios devem ser observados: i) o critério de convergência dentro de um mesmo intervalo de tempo e; ii) a independência do avanço no tempo, Δt , evitando que se tenha um falso regime transitório.

Na Fig. 2 e na Fig. 3, pode-se visualizar a influência do critério de convergência no comportamento transitório do problema. Em dois períodos, o critério de convergência tem influência mais significativa na solução: nos primeiros 5 minutos e após 25 minutos de simulação. No início da simulação, a curva com o valor do resíduo igual a 1,0 kW não mostra a leve redução de temperatura que as demais curvas apresentam. Após 25 minutos, quando se tem uma combustão mais acelerada, a temperatura apresenta maior elevação para os resíduos maiores (Fig. 2), enquanto que o ponto de máximo na curva do coque se reduz (Fig. 3).

Considerando as soluções com resíduo de 0,1kW e 0,001kW, para um $\Delta t=1s$, tem-se uma variação de no máximo 0,01K, e um tempo computacional de 4 e 7s, respectivamente. Ao se definir o critério de convergência através do resíduo, indiretamente define-se o número de iterações do algoritmo. Quanto menor o valor do resíduo, maior o número de iterações, para um mesmo passo de tempo, conseqüentemente, o tempo computacional aumenta.

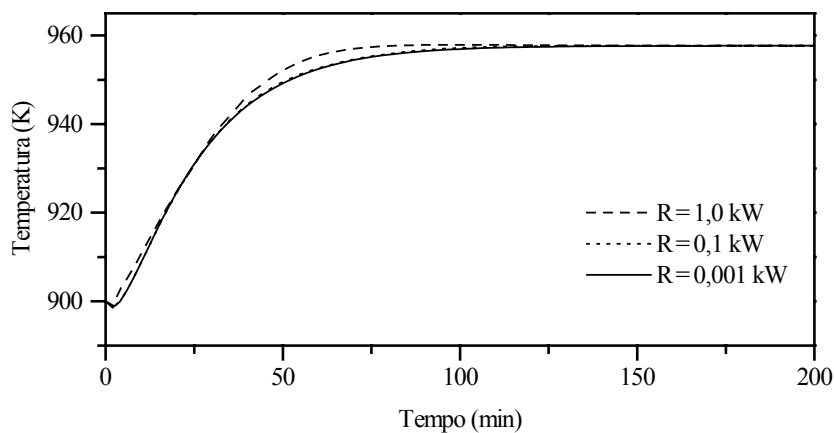


Figura 2. Temperatura da região densa para diferentes resíduos e um Δt de 2 min. Solução do modelo da região densa através do método de diferenças finitas.

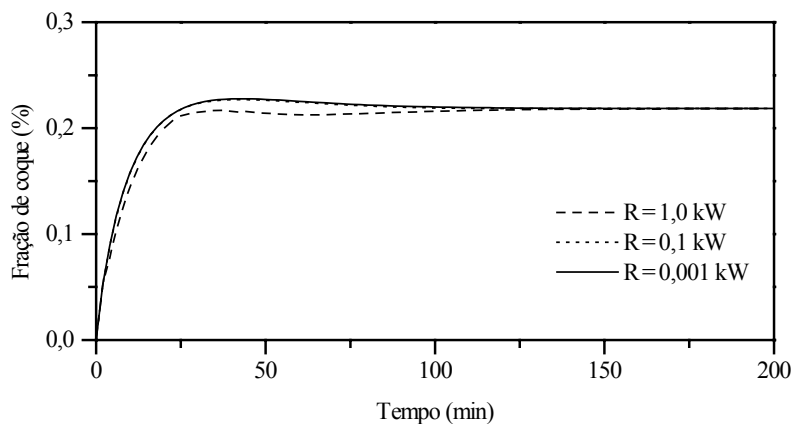


Figura 3. Fração de coque da região densa para diferentes resíduos e um Δt de 2 min. Solução do modelo da região densa através do método de diferenças finitas.

Pela análise anterior, percebe-se que o critério de convergência igual a 0,001kW, mostra-se satisfatório quando comparado à quantidade de energia gerada (48kW) em regime permanente. Em seguida, a análise da independência do Δt será realizada com o resíduo de 0,001kW.

Para a análise da independência do passo de tempo, o problema foi solucionado com diferentes (Δt s). Iniciou-se com um Δt de 120s, que foi sendo reduzido sempre pela metade. As respostas estão mostradas na Fig. 4. Uma vez que o método de solução é implícito, não há restrição quanto aos valores de Δt , como acontece no método explícito. Porém,

valores elevados de Δt podem produzir um transitório distorcido. Nota-se que a diferença entre as curvas com $\Delta t=120s$ e $\Delta t=60s$ é da ordem de 1,5K no ponto de maior diferença. Neste mesmo ponto, a diferença é da ordem de 0,5K, quando se reduz o Δt de 30 para 15 segundos. Observa-se que o Δt que oferece uma solução independente do passo de tempo é bem superior àquele encontrado pelo método de Runge-Kutta.

4.2. Modelo de Duas Regiões

As informações obtidas até agora com a solução do modelo da região densa serão utilizadas na análise do modelo de duas regiões. O fato do modelo da região densa ser uma simplificação do modelo de duas regiões facilita a análise do seu comportamento, quando se incorpora a região diluída.

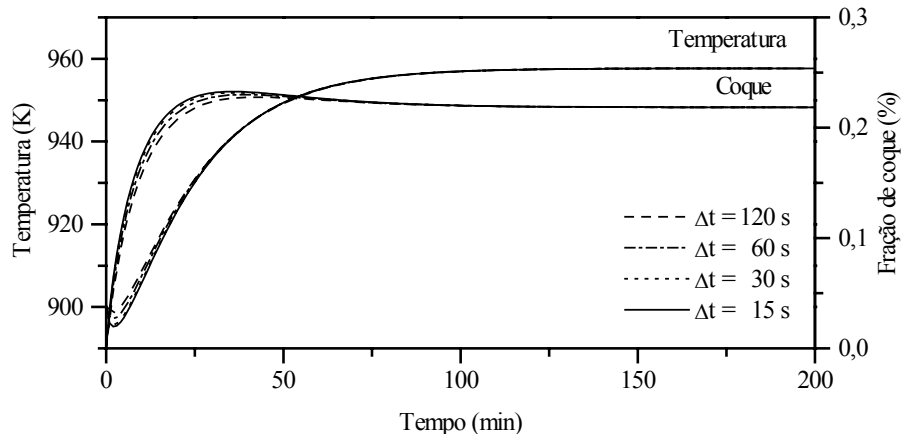


Figura 4. Temperatura e Fração de coque para diferentes Δt s. Solução do modelo da região densa através do método de diferenças finitas.

As condições iniciais da região diluída são uniformes ao longo da altura e idênticas às da região densa. Novamente os dois métodos de solução são aplicados na solução das equações. Lembrando que as equações diferenciais parciais foram aproximadas espacialmente para a aplicação do método de Runge-Kutta.

Diferente do modelo da região densa, o modelo de duas regiões depende da coordenada espacial (altura do regenerador), assim é necessário identificar uma solução que seja também independente da malha espacial.

Partiu-se do passo de tempo utilizado no modelo da região densa e considerou-se que a região diluída era formada por um único ponto. O procedimento adotado foi então dobrar o número de pontos da região diluída e comparar as soluções. Como o Runge-Kutta é um método explícito, a sua estabilidade apresenta uma dependência entre o número de pontos e o valor do passo de tempo. Para um $\Delta t=0,54s$, apenas um ponto na região diluída pode ser utilizado. O aumento do número de pontos só é possível com a redução no passo de tempo, mantendo a relação $\frac{\Delta z}{\Delta t} \geq 5,5m/s$. Na

Fig. 5, tem-se o estado estacionário da temperatura ao longo da altura do regenerador para diferentes números de pontos. Nota-se que quando o número de pontos passa de 10 para 20, tem-se uma variação de 0,25K. A Tab. 2 mostra a sensibilidade da temperatura em relação à malha. O ΔT_{max} é a diferença máxima de temperatura em relação aos resultados da malha com 160 pontos.

O Δt apresentado na Tab. 2 corresponde ao máximo valor possível no passo de tempo, para o número de pontos considerados que garante a estabilidade do método. É importante notar que o valor que garante a estabilidade proporciona também a independência do passo de tempo. Observa-se ainda que dobrando o número de pontos, o tempo de processamento mais do que triplica. A dependência entre o número de pontos e o passo de tempo no método de Runge-Kutta faz com que o tempo computacional torne a simulação do modelo de duas regiões proibitiva. Quando se trabalha com uma malha de 160 pontos, o tempo computacional é de 0,15 minutos simulados por minuto de simulação. Considerando a pequena diferença entre os resultados da malha de 40 e 160 pontos (0,1K), adotou-se a malha com 40 pontos e passo de tempo igual a 0,0115s como satisfatória.

O modelo de duas regiões será agora analisado pelo método de diferenças finitas. O mesmo critério de convergência empregado para o modelo da região densa será utilizado: Somatório dos resíduos menor do que 0,001kW.

No método de diferenças finitas, como mostrado anteriormente, não há restrição ao passo de tempo. A Fig. 6 mostra a evolução temporal da temperatura do catalisador regenerado para diferentes passos de tempo. Como esperado, o estado estacionário é independente do passo de tempo utilizado. A Tab. 3, por sua vez, mostra o erro relativo entre as curvas. Conclui-se então que um $\Delta t=15s$ pode ser considerado satisfatório para representar uma solução independente.

A Fig. 7 apresenta a resposta para a temperatura do catalisador na região densa, considerando diferentes números de pontos e um passo de tempo de 15s. O estado estacionário é modificado em função do número de pontos na região diluída, evidenciando a dependência da região densa em relação à região diluída e por sua vez, a dependência da

resposta da região diluída com o número de pontos da malha. Observa-se que uma malha com 40 pontos é suficiente para que a solução seja considerada independente. A independência da solução com 40 pontos utilizando o método de diferenças finitas coincide com a solução da malha independente do método de Runge-Kutta. Note que por não existir uma dependência do número de pontos com o passo de tempo, pode-se utilizar valores mais elevados para o avanço no tempo, quando comparado ao método de Runge-Kutta, e que ainda garantam a independência da solução. Isto diminui o esforço computacional e conseqüentemente o tempo de simulação.

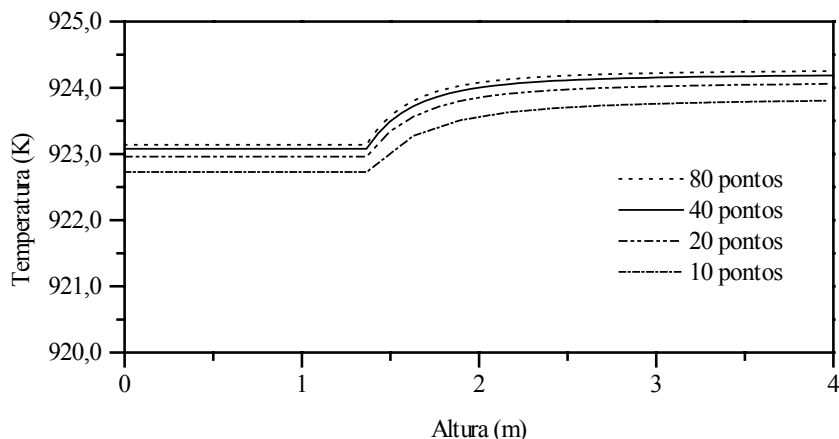


Figura 5. Perfil de temperatura para o modelo de duas regiões com diferentes números de pontos na região diluída. Solução por Runge-Kutta.

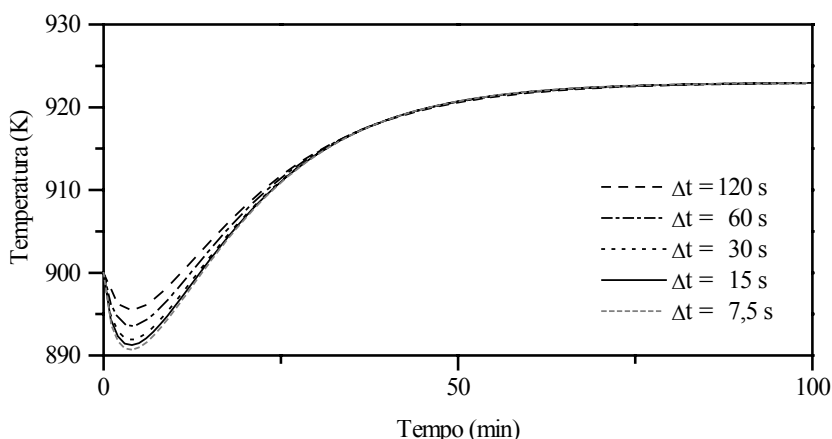


Figura 6. Evolução temporal da temperatura do catalisador regenerado para diferentes valores do passo de tempo, considerando a região diluída com 40 pontos. Solução por diferenças finitas.

Tabela 2 - Valores comparativos para a variação da temperatura em função da malha.

Número de pontos	Δt (s)	ΔT_{\max} (K)	Tempo computacional (min)
5	0,1	2,84	4
10	0,049	0,4459	7,2
20	0,023	0,2533	25,5
40	0,0115	0,1186	78,2
80	0,0060	0,0598	249,7
160	0,0025	-	1333

Tabela 3 - Diferença relativa na temperatura variando-se o passo de tempo.

Passo de tempo (s)	ΔT_{\max} (K)
120 – 60	1,8
60 – 30	1,6
30 – 15	0,66
15 – 7,5	0,05

Vale ressaltar que os métodos de diferenças finitas e Runge-Kutta apresentam resultados muito próximos. Por exemplo, utilizando um passo de tempo de 0,54s, a diferença máxima entre as curvas de temperaturas dos dois métodos foi de 0,04K. Conclui-se que as soluções das duas metodologias mostram-se coerentes quando comparadas.

A Tab. 4 mostra uma comparação do método de diferenças finitas e de Runge-Kutta. Verifica-se que a principal vantagem do método de diferenças finitas sobre o método de Runge-Kutta é o tempo computacional reduzido para uma

solução independente da malha. A predominância computacional é mais evidente quando se trabalha com equações diferenciais ordinárias, como é o caso da região diluída. A vantagem computacional do método de diferenças finitas se perde quando se trabalha com passo de tempo equivalente ao método de Runge-Kutta.

Tabela 4 - Dados comparativos dos métodos de solução utilizando um computador Pentium III, 1,1GHz, 512MB.

	Runge-Kutta	Diferenças Finitas
Tipo de formulação	Explícita	Implícita
Passo de tempo	Limitado pelo método	Limitado pela precisão
Critério de convergência	Não há	Equação da energia Resíduo $\leq 0,01$
Modelo de duas Regiões		
Tempo computacional	Δt e Δy dependentes	Δt e Δy independentes
Solução independente da malha	40 pontos	40 pontos
$\Delta t = 0,0115s$	78,2min	81min
Tempo de simulação para solução independente de Δt	78,2min	1min
Modelo da Região Densa		
Mesmo $\Delta t = 0,54s$	10s	12s
Tempo de simulação para solução independente Δt	10s	1s

5. Conclusões e Discussões

O modelo dinâmico do regenerador, que consiste de equações diferenciais ordinárias (região densa) e diferenciais parciais (região diluída), foi resolvido por dois métodos numéricos: Runge-Kutta de quarta ordem e de diferenças finitas. O primeiro é um método explícito de solução (os valores do tempo posterior dependem apenas de valores do tempo anterior) e o segundo, um método implícito (os valores do tempo posterior dependem de valores no mesmo instante em que estão sendo avaliados). Pela característica explícita, a solução por Runge-Kutta não necessita de iterações. O método de diferenças finitas, por outro lado, requer iterações pelo fato das equações serem implícitas. Um critério de convergência deve então ser definido para limitar o número de iterações. Um valor de 0,001kW para a soma dos resíduos das equações de conservação da energia é empregado como critério de convergência. Uma vez satisfeito este critério, as demais equações de conservação já estarão convergidas.

Observou-se que ambos os métodos são robustos para resolver tais equações, com resultados muito próximos entre si. Entretanto, o método de Runge-Kutta apresenta restrição quanto à magnitude do passo de tempo. Seu valor deve ser muito pequeno para garantir a estabilidade da solução. Este valor, por sua vez, proporciona a independência da solução em relação ao passo de tempo. Para as equações ordinárias, o passo de tempo deve ser igual ou inferior à 0,54s.

Para resolver as equações diferenciais parciais pelo método de Runge-Kutta, as equações foram discretizadas no espaço gerando um conjunto de equações diferenciais ordinárias. Nota-se, entretanto, que o maior valor do passo de tempo que proporciona estabilidade à solução é dependente da magnitude do incremento espacial, ou seja, $\frac{\Delta z}{\Delta t} \geq 5,5m/s$.

O método de diferenças finitas não apresenta restrições quanto à magnitude do passo de tempo. Entretanto, uma análise da independência da solução em relação ao passo de tempo e à malha espacial deve ser realizada. Um valor de 15s para o passo de tempo e 40 pontos na malha espacial proporcionam a independência da solução.

A restrição do método de Runge-Kutta em relação às malhas espacial e temporal requer um tempo computacional bem maior quando comparado ao método de diferenças finitas. As simulações realizadas em um computador Pentium III, 1GHz, 512MB apresentaram uma razão de aproximadamente 80 para 1 dos tempos de solução por Runge-Kutta e por diferenças finitas.

6. Agradecimentos

Os autores gostariam de expressar seus agradecimentos: à PETROBRAS ao FINEP/CTPetro pelo financiamento do projeto Otimização e Controle de Unidades de Craqueamento Catalítico (OCUCC) e à Agência Nacional do Petróleo e FINEP por meio do Programa de Recursos Humano da ANP que proporcionaram a realização do presente trabalho.

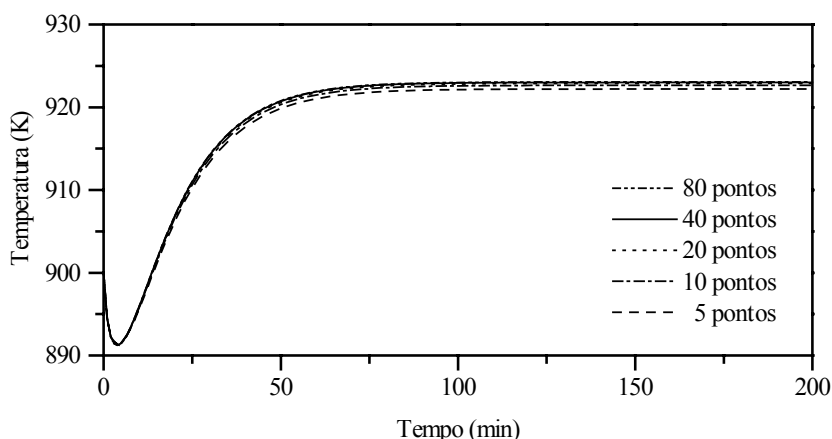


Figura 7. Evolução da temperatura da fase densa com passo de tempo de 15 s e diferentes números de pontos na região diluída. Solução utilizando o método de diferenças finitas.

7. Referências

- Arbel, A.; Huang, Z.; Rinard, I. H.; Shinnar, R., 1995, "Dynamic and Control of Fluidized Catalytic Crackers. part 1 Modeling of the Current Generation of FCC's", *Ind. Eng. Chem. Res.* Vol. 34 p. 1228-1243.
- Abadie, E., 1997, "Craqueamento Catalítico, Relatório Interno", PETROBRÁS, SEREC/CEN-SUD.
- Carnahan, B., 1990, "Applied Numerical Methods", Krieger Publishing Company, Melbourne, FL., 624 p.
- Kunii D.; Levenspiel O., 1996 "Circulating fluidized-bed reactors", *Chemical Engineering Science*, Vol. 52, N. 15, p. 2471-2482.
- Patankar, S., 1980, "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Hemisphere Publishing Corporation, New York, 197p.
- Penteado, J. C., 2003, "Metodologias de Solução Numéricas para Modelos de Regeneradores de Unidades de Craqueamento Catalítico", Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais, Centro Federal de Educação Tecnológica do Paraná, Curitiba-PR, 136p.
- Santos, M. G., "Modelo Dinâmico para o Controle do Conversor de uma Unidade de FCC UOP STACKED", 2000, Dissertação de Mestrado, Departamento de Engenharia Química, UFRGS, Porto Alegre-RS., 138p.

COMPARISON OF THE METHODS OF SOLUTION FOR A FCC REGENERATOR MODEL

Penteado, J. C.

Laboratório de Ciências Térmicas, Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais, Centro Federal de Educação Tecnológica do Paraná, Av. Sete de Setembro, 3165, Curitiba-PR

Negrão, C. O. R.

Laboratório de Ciências Térmicas, Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais, Centro Federal de Educação Tecnológica do Paraná, Av. Sete de Setembro, 3165, Curitiba-PR
e-mail: negrao@cefetpr.br

Rossi, L. F. S.

Laboratório de Ciências Térmicas, Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais, Centro Federal de Educação Tecnológica do Paraná, Av. Sete de Setembro, 3165, Curitiba-PR
e-mail: lfrossi@cefetpr.br

Abstract *The current work presents a mathematical model to simulate the dynamic behavior of FCC regenerator. The model considers the fluidized combustion process is divided in two regions: dense and diluted. The dense region is still divided in two phases: bubble and emulsion, where the properties are admitted uniform. In the diluted region, the properties vary along the regenerator height. The model is composed of mass and energy conservation equations. The dense region equations are ordinary differential equations, with time changes, and the diluted region equations, partial differential equations, with time and space changes. The differential equations are solved by two numerical methods: 4th order Runge-Kutta and the finite difference. Comparisons of the two methods indicate both methods provide the same results. However, the finite difference method requires less computational time.*

Keywords: Regenerator, Regenerador, FCC, Numerical Modeling