

MODELAGEM E SIMULAÇÃO DINÂMICA DE UM CONVERSOR DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO

Raul Henrique Erthal, Cezar O. R. Negrão, Luciano F. S. Rossi

Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais - PPGEM
Centro Federal de Educação Tecnológica do Paraná – CEFET-PR
Av. Sete de Setembro, 3165, Curitiba, PR, Tel. (41) 310-4870, rherthal@cefetpr.br

Charles Gentilim, Flávio Neves Jr.

Programa de Pós-graduação em Engenharia Elétrica e Informática Industrial - CPGEI
Centro Federal de Educação Tecnológica do Paraná – CEFET-PR
Av. Sete de Setembro, 3165, Curitiba, PR, Tel. (41) 310-4707, neves@cpgei.cefetpr.br

Resumo. O presente trabalho tem por objetivo apresentar um modelo dinâmico de um conversor de craqueamento catalítico fluidizado (FCC). Os três principais componentes do FCC são incluídos na modelagem: o elevador, o conjunto vaso separador/retificador e o regenerador. Para representar a cinética das reações no elevador, é empregado um modelo de 4-classes e o escoamento gás-sólido é considerado unidimensional e quase-estático. Tanto no conjunto vaso separador/retificador quanto no regenerador, as propriedades físico-químicas são consideradas uniformes ao longo do volume de controle. O regenerador é composto de uma região densa que compreende duas fases. São utilizados os princípios de conservação da quantidade de movimento, da energia e da massa, dando origem a um conjunto de equações diferenciais ordinárias. As equações do elevador são resolvidas pelo método das diferenças finitas e as equações para o vaso separador e regenerador são solucionadas pelo método de Runge-Kutta de quarta ordem. Uma análise de sensibilidade do critério de convergência, da resolução da malha para as equações do elevador, bem como do passo de tempo para as demais equações foi conduzida. Resultados em regime permanente foram comparados com valores experimentais, mostrando-se promissores. Estudos de casos foram também realizados com a finalidade de avaliar as respostas dinâmicas do modelo do conversor. Algumas variáveis controladas são submetidas a distúrbios, provocando ações de controle do tipo Proporcional-Integral.

Palavras chave FCC, modelagem dinâmica, ação de controle

1. Introdução

O craqueamento catalítico fluidizado (FCC) é um processo de aproveitamento de produtos de baixo valor comercial tais como, gasóleos e resíduos do processo de refino do petróleo. Ilustrado esquematicamente na Fig. 1, o processo consiste nas reações de quebra de cadeias carbônicas na presença de um catalisador, produzindo hidrocarbonetos mais leves de maior valor comercial.

Um conversor FCC é composto basicamente por um reator tubular vertical de fluxo ascendente (elevador), um vaso separador/retificador e um regenerador, cuja distribuição é apresentada na Fig. 2. O processo de craqueamento catalítico ocorre no principal equipamento do conversor, o elevador. A carga, em torno de 250°C e na forma líquida atomizada, é misturada com um catalisador particulado a alta temperatura (700°C). O catalisador, ao ser admitido na base do elevador, entra em contato com a carga, provocando sua vaporização e suprindo de energia as reações endotérmicas de craqueamento. Além das frações mais leves, estas reações produzem também o coque, um resíduo do craqueamento responsável pela desativação do catalisador. O catalisador é arrastado pela carga vaporizada de maneira que o seu tempo de residência (tempo de permanência do catalisador no elevador) é da ordem de 1 a 4s.

Após passar pelo elevador, a mistura vapor-catalisador (em torno de 530°C) segue para o vaso separador, onde os produtos são retirados pela parte superior através de ciclones. Em seguida, o catalisador dirige-se por gravidade ao retificador, e sofre um processo de retificação por injeção de vapor d'água para a remoção da maior parte dos hidrocarbonetos remanescentes no catalisador. Na seqüência, as partículas de catalisador seguem para o regenerador, passando por uma válvula de controle de nível de catalisador (LCV) no vaso separador.

O coque impregnado no catalisador sofre combustão no regenerador, em um leito fluidizado. Seu poder calorífico é suficiente para elevar a temperatura do catalisador. Os gases resultantes da combustão são separados do catalisador em ciclones posicionados no topo do regenerador. O catalisador, com baixo teor de coque, e portanto com sua atividade recuperada, é devolvido ao elevador através da válvula de controle de temperatura (TCV). Esta válvula, através da vazão de catalisador, controla a temperatura no topo do elevador. Chegando ao elevador, o catalisador é misturado novamente à carga de alimentação, completando assim o ciclo. As informações acima tiveram como fonte o trabalho de Abadie (1997).

A modelagem matemática do processo é certamente um dos maiores desafios dos profissionais do setor, pois, além de apresentarem um grande número de variáveis, as equações são fortemente não-lineares. Dependendo da fidelidade exigida, a modelagem do FCC pode ser de alta complexidade. McFarlane et al. (1990), por exemplo, desenvolveram um modelo voltado para a análise da variação de determinados parâmetros potenciais para controle. Arbel et al. (1995)

apresentam um trabalho de modelagem dinâmica do elevador para controle de conversores empregando o modelo de dez classes¹ de Jacob e Weekman (1976). Ellis e Riggs (1998) combinaram o simulador dinâmico apresentado por McFarlane et al. (1990) com os modelos de dez classes de Jacob et al. (1976) e Arbel et al. (1995). Outros modelos de conversores apresentam o comportamento de parâmetros em regime estacionário como o de Lansarin (1997), utilizando uma cinética de dez classes. Santos (2000) modelou dinamicamente uma unidade FCC, considerando também a cinética de dez classes e Han e Chung (2000), um conversor *side-by-side*, utilizando a cinética de quatro classes.

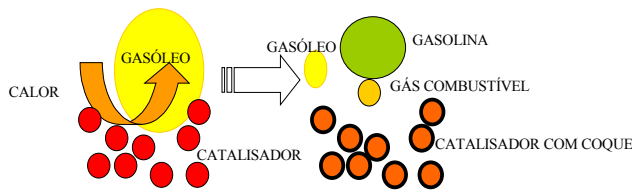


Figura 1 - Ilustração simplificada do processo de craqueamento (Erthal, 2003).

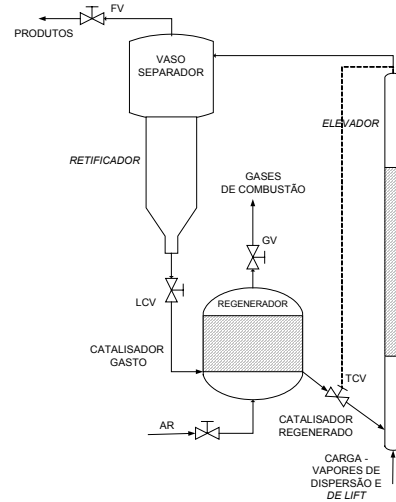


Figura 2 - Esquema simplificado do conversor FCC (Erthal, 2003).

O presente trabalho apresenta um modelo dinâmico de um conversor FCC com ênfase na modelagem e solução das equações do elevador, utilizando a cinética de quatro classes (gasóleo, gasolina, coque e gases com cadeias de um a 4 átomos de carbono).

2. Modelo Matemático

2.1 Modelo do Elevador

O modelo do elevador considera o escoamento gás-sólido como bifásico e unidimensional. Assume-se que o elevador é adiabático e que as reações de craqueamento ocorrem muito rapidamente quando comparadas aos processos no vaso separador e no regenerador. Desta forma, o processo no elevador é assumido como quase-estático, ou seja, qualquer alteração nos seus contornos (vazões, temperaturas e pressões) modifica imediatamente o escoamento e o craqueamento. Sendo assim, as variações no tempo são desprezadas nas equações de conservação.

A equação da conservação da quantidade de movimento para a fase i , aplicada ao volume infinitesimal da Fig. 3 assume a forma:

$$\frac{d\rho_i \varepsilon_i v_i^2}{dz} = -\frac{dP \varepsilon_i}{dz} - \rho_i g \varepsilon_i - \frac{4\tau_{pi} \varepsilon_i}{d_r} \pm F_D \varepsilon_i \quad (1)$$

onde i indica as fases sólida ou gasosa, ε é a fração volumétrica, z é a posição, ρ é a massa específica e v é a velocidade. P é a pressão e d_r é o diâmetro interno do elevador. τ_{pi} é a tensão de cisalhamento entre a parede e a fase i (Han e Chung, 2000, Martignoni, 2000 e Yang, 1978) e F_D , a força de arraste. As temperaturas das fases sólida e gasosa são determinadas pelo balanço de energia:

$$\frac{\dot{m}_i c_{p,i}}{A_r} \frac{dT_i}{dz} = [\kappa h_c A_c (T_i - T_l) + \beta \rho_i \varepsilon_i \dot{Q}_R], \quad (2)$$

onde o índice i indica a fase sólida ou gasosa e l , a fase que troca calor com a fase i . $\kappa = -1$ e $\beta = 0$ para a fase sólida e $\kappa = 1$ e $\beta = 1$ para a fase gasosa. A_r e A_c são as áreas da seção transversal do elevador e superficial efetiva do catalisador,

¹ Classes são frações distintas ou agrupamentos de compostos com características similares entre si, tais como a massa molecular e o ponto de ebulição (Martignoni, 2000).

respectivamente. T é a temperatura, \dot{m} , a vazão mássica e c_p , o calor específico. h_c é o coeficiente de transferência de calor entre as fases, \dot{Q}_R é o calor de formação dos componentes da fase gasosa (Han e Chung, 2000). As moléculas mais pesadas de gasóleo são quebradas produzindo moléculas menores tais como, gasolina, gás combustível e coque. A classe gasolina produz moléculas de gás combustível e coque. Como a conversão de gás combustível é pequena, o modelo não considera esta transformação. A composição da fase gasosa ao longo do elevador é definida pela equação da conservação das espécies aplicada a um volume de controle infinitesimal:

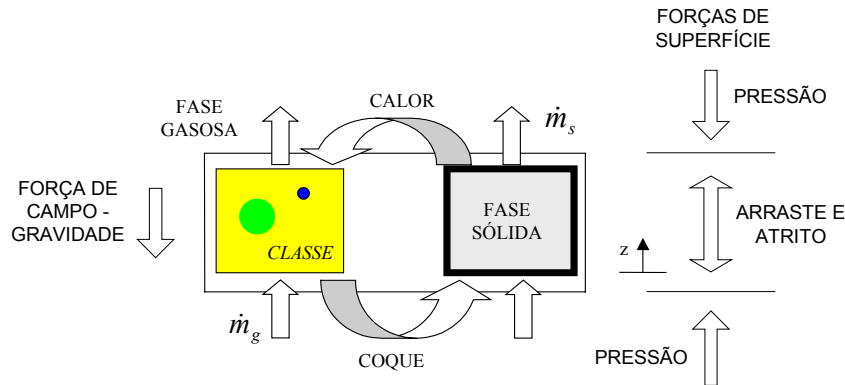


Figura 3 - Transferência de massa, energia e quantidade de movimento entre as fases sólida e gasosa em um volume de controle infinitesimal no elevador. (Erthal, 2003)

$$\dot{m}_g \frac{dy_j}{dz} = \rho_g \varepsilon_g A_r R_j \phi_c \quad (3)$$

onde os índices j e g indicam cada uma das classes e a fase gasosa, respectivamente. y é a fração mássica, ϕ_c é a função desativação do catalisador (Han e Chung, 2000) e R_j é a taxa de produção de cada classe:

$$R_j = \sum k_{jk} y_j^n, \quad (4)$$

onde $n=2$ para reações de segunda ordem (conversões a partir do gasóleo) e $n=1$ para reações de primeira ordem (demais conversões) e k_{jk} são as constantes cinéticas da transformação da classe k na classe j , avaliadas pela equação de Arrhenius (Han e Chung, 2000).

A fração de sólidos do escoamento no elevador é avaliada pela definição de vazão mássica e a fração de vazios é calculada pelo seu complemento. A massa específica da fase gasosa é determinada pela equação dos gases ideais.

2.2 Modelos do Vaso Separador/Retificador e Regenerador

O conjunto vaso separador/retificador é considerado adiabático, de formato cilíndrico, montado numa estrutura única. Existem trocas de calor entre o catalisador, o coque e o vapor d'água e não são consideradas reações químicas em seu interior. Assume-se que não há arraste de catalisador para a corrente de gases e a pressão à jusante da válvula de controle de produtos (FV) é uniforme. O regenerador é admitido como um leito de fluido borbulhante, sem arraste de partículas sólidas, composto de uma região densa dividida em duas fases uniformes: bolha e emulsão (Penteado, 2003). Neste modelo, são feitas as seguintes considerações: a combustão do coque acontece somente na fase emulsão; pode ocorrer a oxidação de CO na fase bolha; o gás efluente do regenerador é composto por CO, CO₂, O₂, H₂O e N₂; o calor específico do catalisador é suposto constante para a faixa de temperatura de trabalho e o calor específico dos gases é função da temperatura. Há troca de energia e de massa entre as fases e, sólidos e gases estão em equilíbrio na fase emulsão; não há catalisador na fase bolha; a fase emulsão é onde acontecem efetivamente as reações de combustão e é composta de gases na condição de mínima fluidização.

2.2.1 Conservação da Massa de Gás e de Catalisador

O balanço de massa de catalisador e gases no vaso separador, assim como, de catalisador, e gases, no regenerador, pode ser escrito como:

$$\frac{dm_I}{dt} = \dot{m}_e - \dot{m}_s, \quad (5)$$

onde m_1 é a massa de gases ou catalisador no vaso separador/retificador ou no regenerador e \dot{m} é vazão mássica de catalisador ou gases. Os índices e e s representam a entrada e a saída de cada componente, respectivamente.

2.2.2 Conservação da Massa de Coque

Da mesma forma, o acúmulo de coque no vaso separador/retificador e no regenerador pode ser avaliado pela seguinte equação de conservação da massa:

$$m_c \frac{dw}{dt} = (w_e - w + \alpha w_h) \dot{m}_{c,e} - \lambda r_{q,E}'' M_q V_E. \quad (6)$$

Os índices c e E indicam catalisador e fase emulsão, respectivamente. Para o vaso separador, $\alpha=1$ e $\lambda=0$, e para o regenerador, $\alpha=0$ e $\lambda=1$. w é o teor de coque. w_h é o teor de coque formado pelos hidrocarbonetos remanescentes do processo de craqueamento, não retificados. $r_{q,E}''$ é a taxa de consumo de coque por unidade de volume na fase emulsão do regenerador, M_q é a massa molecular do coque.

2.2.3 Conservação das Espécies Químicas

Escrevendo a equação da conservação das espécies químicas para cada um dos gases, J , presentes nas fases K (bolha ou emulsão) do regenerador, tem-se a seguinte equação diferencial:

$$\frac{dC_{J,K}}{dt} = (C_{J,a} - C_{J,K}) \frac{v_{g,K}}{L_D} + \gamma \delta (C_{J,B} - C_{J,E}) + \mu r_{J,K}'' \quad (7)$$

C é a concentração do gás. Os índices a e B representam, respectivamente, o ar e a fase bolha. L_D é o nível da região densa. Para o caso da fase emulsão, $\gamma = D_{BE} / [\varepsilon_{mf} (1 - \delta)]$ e $\mu = 1 / \varepsilon_{mf}$. δ é a fração de bolhas no leito fluidizado e ε_{mf} , a fração de vazios de mínima fluidização. D_{BE} é o coeficiente de transferência de massa de gás entre a fase bolha e a emulsão. $r_{J,K}''$ é a taxa de geração do componente J por unidade de volume da fase K . Para a fase bolha, formada pelos gases que excedem a condição mínima de fluidização, γ e μ são iguais a um.

2.2.4 Conservação da Energia

Um balanço de energia no vaso separador/retificador envolvendo os fluxos de catalisador, coque e vapor, resulta na seguinte equação:

$$\left[m_c c_{p,c} + m_q c_{p,q} + m_v c_{p,v} \right] \frac{dT_{VS}}{dt} = \left[\dot{m}_c (h_c - h_{VS}) + \dot{m}_q (h_q - h_{VS}) + \dot{m}_v (h_v - h_{VS}) \right] \quad (8)$$

onde os índices q , v e VS representam, respectivamente, o coque, o vapor e o vaso separador. h é a entalpia.

As temperaturas das fases bolha e emulsão no regenerador são avaliadas através de um balanço de energia nas respectivas fases:

$$\begin{aligned} (\xi m_{c,K} c_{p,c} + m_{g,K} c_{p,gK}) \frac{dT_K}{dt} = & \xi \left[\dot{m}_{c,e} c_{p,c} (T_{c,e} - T_K) + \dot{m}_{c,s} c_{p,c} (T_{c,s} - T_K) \right] + \dot{m}_{a,K} \left[c_{p,a} T_a - c_{p,gK} T_K \right] + \\ & \sum \Delta H_r r_{J,K}'' M_J V_K + \dot{Q}_D + \xi \dot{Q}_p \pm \dot{Q}_{BE} \end{aligned} \quad (9)$$

onde ΔH_r é a entalpia de reação. Para a fase emulsão, $\xi=1$ e $\dot{Q}_D = D_{BE} V_B M_{O_2} (C_{O_2,B} - C_{O_2,E}) \Delta H_{O_2}$ e para a fase bolha, $\xi=0$ e $\dot{Q}_D = D_{BE} V_E M_K (C_{K,B} - C_{K,E}) \Delta H_K$. $\Delta H_{O_2,E}$ é a diferença de entalpia do oxigênio entre as fases emulsão e bolha e C_{O_2} é concentração de oxigênio.

2.2.5 Equação de Estado

A pressão no vaso separador/retificador é calculada substituindo a equação dos gases ideais na conservação da massa de gases. Rearranjando tal expressão, tem-se:

$$\frac{dP_{VS}}{dt} = \frac{\bar{R}T_{VS}}{M_{g,VS}} \left[\frac{dm_{g,VS}}{dt} + \frac{\rho_{g,VS}}{\rho_c} \frac{dm_{c,VS}}{dt} \right] + \frac{P_{VS}}{T_{VS}} \frac{dT_{VS}}{dt} \quad (10)$$

A pressão no regenerador é calculada pela equação dos gases ideais.

2.3 Algoritmos de Controle

O modelo será também submetido a ações de controle do tipo Proporcional Integral (PI). A ação de controle, $u(t)$, é representada por:

$$u(t) = K_p e(t) + K_I \int_0^t e(t) dt \quad (11)$$

$e(t)$ é o erro (diferença entre o valor medido e o valor de desejado) e K_p e K_I são os ganhos proporcional e integral, respectivamente. As ações de controle são aplicadas às válvulas de controle de temperatura (TCV), de controle de nível no vaso separador (LCV), de controle de pressão no regenerador (GV) e controle de pressão no vaso separador (FV).

3.0 Metodologia de Solução

A seguir, são descritas as metodologias de solução das equações do modelo do conversor. As soluções são consideradas separadamente para cada componente e em seguida são integradas formando um conjunto simultâneo de equações. As condições de contorno do problema são: temperatura do gás-óleo, vazão de gás-óleo, vazões de vapores de *lift* e de dispersão, temperaturas de vapor de *lift* e de dispersão no elevador, vazão de ar de alimentação no regenerador, pressão atmosférica, pressão dos gases na fracionadora e pressão dos gases na caldeira de CO.

3.1 Elevador

As equações de conservação da massa, quantidade de movimento e energia no elevador são discretizadas e resolvidas pelo método de diferenças finitas. As equações algébricas geradas são solucionadas a partir da base até o topo do elevador. Como as equações são não-lineares, são realizadas iterações entre as variáveis. Uma equação de correção para a pressão é derivada a partir da conservação da massa. A correção da pressão cessa quando a conservação da massa é satisfeita.

Durante o processo de solução, admite-se que a pressão no topo do elevador, bem como a vazão de catalisador são conhecidas (idêntica à pressão no vaso separador). O processo de solução implementado requer que a pressão na base do elevador seja conhecida, uma vez que a solução ocorre da base para o topo. Sendo assim, um valor para a pressão na base é estimado e a pressão é avaliada ponto a ponto ao longo do escoamento. Compara-se então o valor da pressão no último ponto com a pressão no topo. A diferença é utilizada para corrigir a pressão na base. Isto é feito porque o gradiente de pressão ao longo do elevador é aproximadamente constante.

Dois critérios de convergência foram adotados para as equações do elevador: resíduos relativos das equações de conservação da quantidade de movimento das fases gasosa e sólida e da equação da conservação da massa da fase gasosa

3.2 Vaso Separador/Retificador e Regenerador

Tanto as equações do vaso separador/retificador quanto do regenerador foram resolvidas pelo método de Runge-Kutta de 4ª ordem. Os detalhes da solução destes modelos são apresentados por Penteadó (2003), respectivamente.

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

4. Resultados

Os resultados são dedicados à verificação do modelo desenvolvido e a estudos de casos. Considerando que o modelo do elevador é unidimensional e quase-estático, fez-se, inicialmente, uma análise de sensibilidade do critério de convergência e da malha empregada. Após definir a malha e o critério de convergência para o elevador, verificou-se a independência dos resultados em relação ao passo de tempo utilizado no modelo completo do conversor. Em seguida, uma comparação preliminar com resultados experimentais é apresentada.

Algumas potencialidades do modelo são mostradas através de três estudos de casos. Estes casos correspondem à aplicação de distúrbios nas seguintes variáveis operacionais: pressão no topo do vaso separador; temperatura na saída do elevador; diferencial de pressão entre o regenerador e o vaso separador. Independentemente do caso analisado, o nível de catalisador no vaso separador está sempre controlado, como procedimento de segurança. Em todos os casos, após um período de estabilização das variáveis, o valor desejado da variável controlada é alterado.

4.1 Verificação Numérica

4.1.1 Elevador

Os resíduos relativos de 0,01%, 0,1% e 1% foram utilizados para verificar a convergência do modelo do elevador. A pressão e a temperatura mostram resultados praticamente idênticos, independentes do critério adotado (ver Fig. 4). A velocidade, entretanto, apresenta oscilações ao longo do elevador, para o critério de convergência de 1%, conforme mostra a Fig. 5. Independente da malha, estas oscilações sempre acontecem para o critério de convergência de 1% ou acima deste valor.

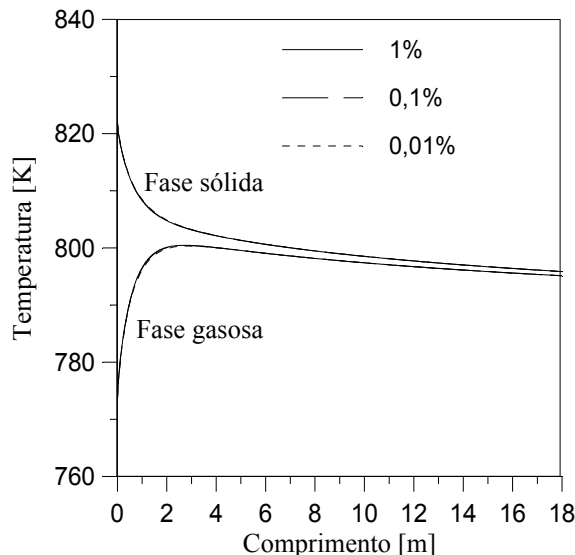


Figura 4 – Temperaturas das fases gasosa e sólida ao longo do elevador, para uma malha com 72 pontos.

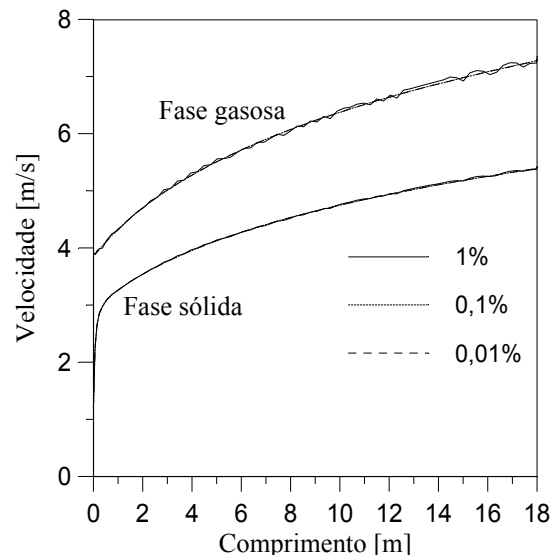


Figura 5 – Velocidades das fases gasosa e sólida ao longo do elevador, para uma malha com 72 pontos.

Através da análise de um resultado inicial, utilizando uma malha uniforme, constatou-se que as maiores mudanças das variáveis ocorrem próximas à base do elevador. Como consequência desta observação, optou-se pela aplicação de uma malha não uniforme, representada pela equação:

$$\Delta z = k \frac{L}{C_1 + \frac{C_2}{e^{(z)^2}}}, \quad (12)$$

onde Δz é o espaçamento da malha, avaliado em função da posição z no elevador, k é um fator de escala e L é o comprimento do elevador. C_1 e C_2 são constantes avaliadas na tentativa e erro de forma a obter a melhor distribuição possível. Na seqüência, foi feita uma análise de sensibilidade da malha para os critérios de convergência de 0,1 e 0,01%. Para isto, utilizaram-se malhas com os seguintes números de pontos: 72, 141, 280 e 557. Os resultados para o critério de convergência 0,1% estão mostrados nas Figs. 6 e 7. Note que a sensibilidade dos resultados é muito pequena em relação ao número de pontos da malha. Isto também é verdadeiro para o critério de convergência 0,01%.

É importante ressaltar que o tempo de processamento aumenta com o número de pontos da malha e com a redução do critério de convergência. É natural, portanto, que se escolha uma combinação que garanta a fidelidade do modelo e proporcione um tempo de processamento reduzido. Para simulação do modelo completo do FCC, foi adotado um critério de convergência de 0,1% e 72 pontos distribuídos no elevador.

4.1.2 Conversor

Para a análise do passo de tempo na simulação do conversor, os seguintes valores foram testados: 0,2, 0,1 e 0,05s. Verificou-se que simulações com passo de tempo superior a 0,2s são instáveis e portanto não foram consideradas. É importante dizer que as equações que limitam o passo de tempo são as equações do regenerador, resolvidas pelo método de Runge-Kutta de quarta ordem. Sendo um método explícito de solução, existe um valor máximo para o passo de tempo que proporciona uma solução estável.

As soluções com os passos de tempo 0,2, 0,1 e 0,05s são praticamente idênticas entre si. Conclui-se portanto, que o passo de tempo que proporciona uma solução independente é idêntico ao valor que fornece uma solução estável.

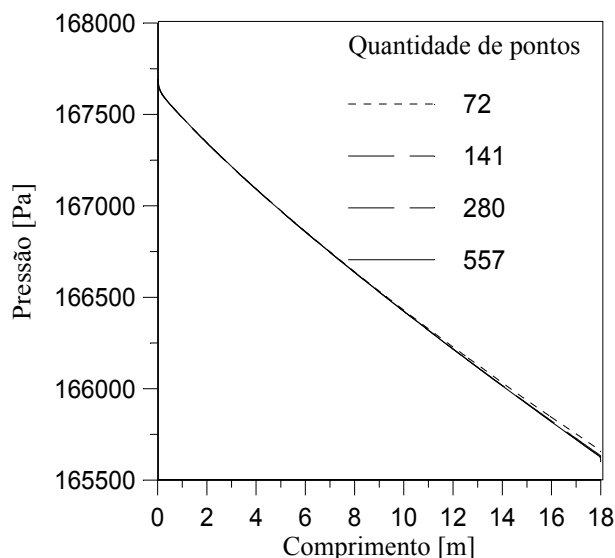


Figura 6 – Pressão ao longo do elevador, para um critério de convergência de 0,1%.

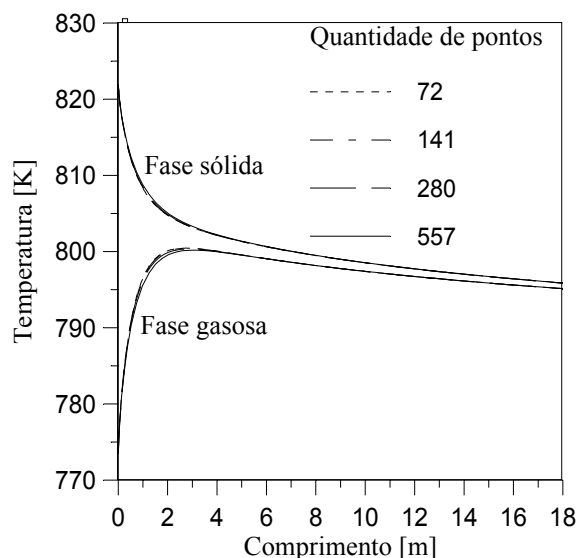


Figura 7 – Temperatura ao longo do elevador, para um critério de convergência de 0,1%.

4.2 Verificação Experimental

Nesta etapa foi realizada uma comparação em regime estacionário dos resultados do modelo, com valores obtidos de uma planta piloto de FCC, da PETROBRAS/SIX (Superintendência da Industrialização do XISTO), localizada em São Mateus do Sul. Os dados operacionais e geométricos da planta podem ser encontrados em Erthal (2003). A Tab. 1 apresenta uma comparação entre os resultados do modelo e alguns valores experimentais. Note que existem algumas discrepâncias nas variáveis apresentadas. As vazões de gases de combustão, por sua vez, apresentam uma diferença na faixa de 10%. Em relação à composição dos gases de combustão, pode-se verificar que o valor numérico é semelhante ao registrado na planta.

O modelo de cinética é muito dependente do tipo de carga e de catalisador utilizados. Vale ressaltar que não houve ajuste do modelo para tal situação. Entende-se, no entanto, que o modelo é promissor. Outras comparações, principalmente em relação às frações mássicas das classes, deverão ser realizadas.

4.3 Estudos de Casos

Nos estudos de casos, são avaliadas as respostas transitórias da planta de FCC após um distúrbio aplicado em algumas variáveis. Estes distúrbios são seguidos de ações de controle que procuram manter controladas certas variáveis, em valores previamente estabelecidos, através da manipulação de outras variáveis.

4.3.1 Caso 1: Degrau na Pressão no Topo do Vaso Separador

Este caso considera a pressão no topo do vaso separador e o nível de catalisador no vaso separador como variáveis controladas, sendo as aberturas das válvulas FV e LCV as variáveis manipuladas. Um aumento de 5% no valor desejado

da pressão do vaso separador, no instante 25 segundos, provoca uma ação de controle que fecha a válvula FV e reduz rapidamente a vazão de gás, como mostrado na Fig. 8. Esta redução, como se vê na Fig. 9, provoca um aumento da pressão no vaso separador.

Tabela 1 – Comparação dos resultados da planta piloto e do modelo em regime estacionário.

	Variável	Planta	Modelo
Teor de coque (%)	catalisador gasto	1,415	1,279
	regenerado	0,048	0,069
Temperaturas (K)	vaso separador	793	818
	regenerador	988	992
	elevador topo	817	826
	elevador base	841	880
	gases combustão	900	992
Pressão (kPa)	retificador – base	169,7	165,5
	elevador – topo	156,9	156,9
	montante – LCV	226,5	226,0
Vazão (kg/s)	gases combustão	0,0574	0,0476
Composição gases combustão (%)	CO	0	0,34
	CO ₂	8,31	6,8
	N ₂	79,566	77,47
	O ₂	11,166	11,82

O aumento da pressão no vaso separador reduz a vazão de catalisador pelo elevador e por consequência pela válvula TCV. Desta forma, a temperatura na saída do elevador diminui (Fig. 11), como resultado da redução do craqueamento. O aumento da pressão no vaso separador provoca um aumento da vazão de catalisador pela válvula LCV e portanto, ocorre uma redução do nível de catalisador no vaso separador. Assim sendo, o controle atua fechando a válvula LCV (Fig. 10), procurando manter o nível inicial. Com a diminuição do erro da pressão (diferença entre o valor desejado e o obtido) no vaso separador, o controle atua abrindo a válvula FV, aproximando a pressão do valor ajustado. Quando a pressão ultrapassa o valor pretendido de 164,8kPa, no instante 28s, o erro muda de sinal, provocando um comportamento inverso da ação de controle com o fim de trazer a pressão de volta ao valor pretendido. Num primeiro instante, a pressão atinge o valor máximo em torno de 167kPa. Pelas características do controlador utilizado, este processo se repete com as pressões oscilando em torno do valor desejado, com amplitudes decrescentes, até estabilizar em 164,8kPa no instante 45s. Embora a pressão tenha estabilizado no valor desejado, note que o controle, através da manipulação da válvula LCV, continua atuando para recuperar o nível de catalisador até o instante 170s (Fig. 10). Quando esta condição é alcançada, as vazões não se alteram mais, assim como a temperatura de saída do elevador que estabiliza em 817,4K.

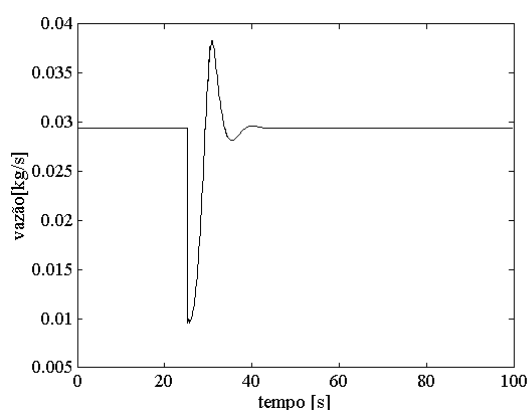


Figura 8 - Vazão através da válvula FV (caso 1).

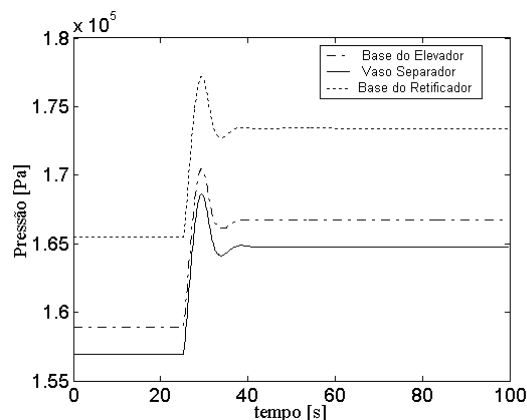


Figura 9 - Comportamento das pressões (caso 1).

4.3.2 Caso 2: Degrau na Temperatura de Saída do Elevador

Neste caso, as variáveis controladas são a temperatura no topo do elevador e o nível de catalisador no vaso separador e as manipuladas são as aberturas das válvulas TCV e LCV. Esta simulação corresponde à aplicação de um degrau no valor desejado da temperatura de saída do elevador, reduzindo de 826,7K para 816,7K. No instante inicial quando a temperatura é de 826,7K, ocorre um erro de 10K, provocando o fechamento da válvula TCV, reduzindo a

vazão de catalisador pelo elevador (Fig. 12). Com a diminuição da vazão de catalisador, diminui-se o craqueamento no elevador, provocando queda na temperatura do topo, como ilustrado na Fig. 13. Note que em torno do instante 250s a temperatura já se encontra bem próxima do valor ajustado. Em função da redução da vazão mássica de catalisador na saída do elevador, o nível de catalisador no vaso separador tende a diminuir. O controlador fecha então a válvula LCV, diminuindo a vazão de catalisador na saída do vaso separador. Quando o nível restabelece seu valor original, as vazões através das válvulas LCV e TCV se igualam por volta do instante 430s.

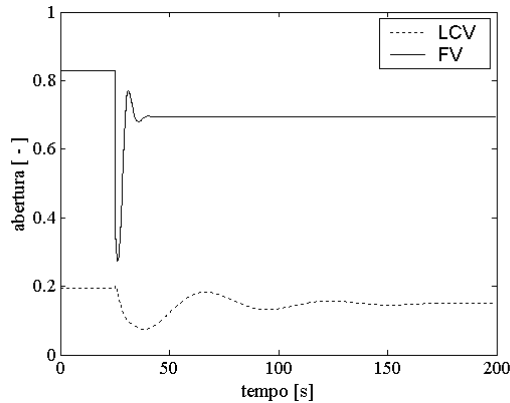


Figura 10 – Aberturas das válvulas LCV e FV (caso 1).

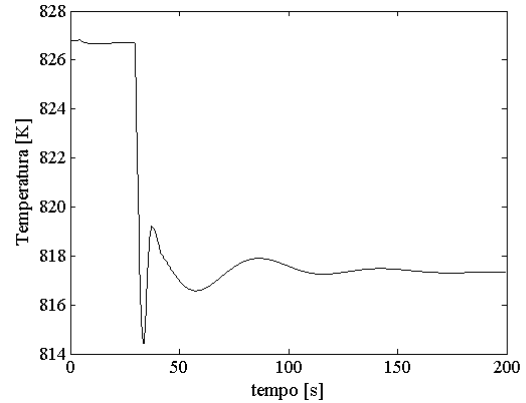


Figura 11 – Temperatura no topo do elevador (caso 1).

A temperatura do vaso separador responde de uma forma mais lenta às variações de temperatura e vazão do catalisador na saída do elevador. Como se vê na Fig. 13, devido à quantidade de catalisador presente no equipamento ser muito maior que no elevador, esta queda de temperatura é mais lenta. Por volta do instante 240s, o seu valor iguala-se à temperatura no topo do elevador, continuando em queda. Esta tendência se justifica pela temperatura do vapor de retificação ser menor do que a temperatura do catalisador. Assim, seu valor tende a estabilizar num patamar inferior ao da temperatura de entrada de catalisador, em torno de 805 K. Para facilitar a visualização das variáveis nos instantes iniciais, a estabilização não é mostrada.

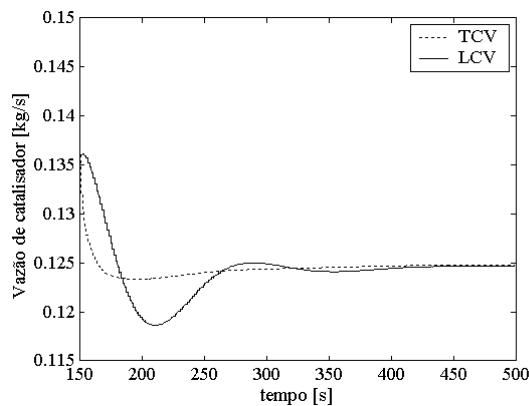


Figura 12 - Vazões de catalisador pelas válvulas TCV e LCV (caso 2).

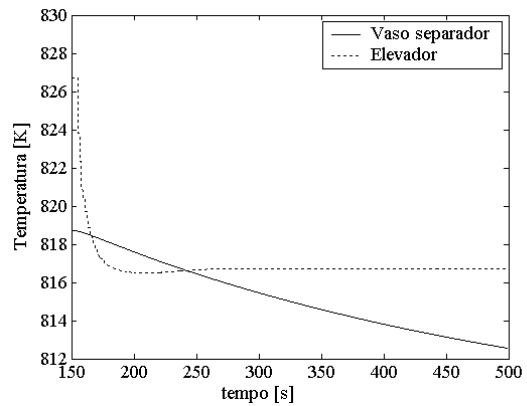


Figura 13 - Temperatura no topo do elevador (caso 2).

4.3.3 Caso 3: Degrau no Diferencial de Pressão entre o Regenerador e o Vaso Separador

A diferença de pressão entre o vaso separador/retificador e o regenerador e o nível de catalisador no vaso separador são agora as variáveis controladas, enquanto que as manipuladas são as aberturas das válvulas GV e LCV. No início da simulação, observa-se (Fig. 15) que a diferença de pressão se encontra em torno de 30kPa. No instante 50s, o valor desejado é alterado para 28,5kPa e em conseqüência disto, ocorre um erro de 1,5kPa. O controle, então, atua na abertura da válvula de gás, GV, fazendo variar sua vazão, como ilustrado na Fig. 14. Nos primeiros instantes, a vazão de gases aumenta provocando uma diminuição intensa na pressão do regenerador, e conseqüentemente no diferencial de pressão. Quando a variável controlada atinge o valor desejado pela primeira vez, no instante 51s, o erro muda de sinal e o controle atua no sentido de reduzir a vazão através da válvula GV. Com isto, reduz-se a inclinação da queda no diferencial de pressão até que, no instante 53s, a pressão atinge seu menor valor e começa a aumentar novamente. Este

comportamento se repete até que o valor desejado seja alcançado no instante 73s. O diferencial de pressão estabiliza, então, em 5% do valor original.

As oscilações observadas, quando da aplicação do degrau, são decorrentes das características discretas do controlador Proporcional Integral.

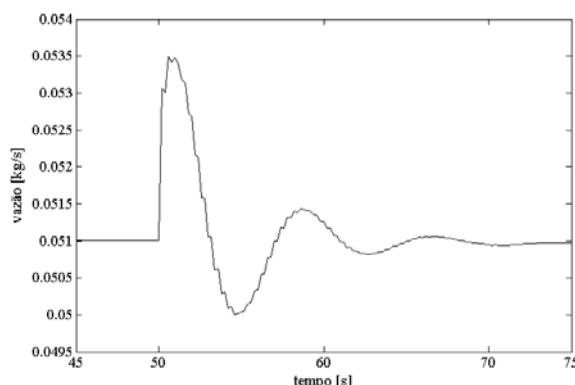


Figura 14 - Vazões de gás pela válvula GV (caso 3).

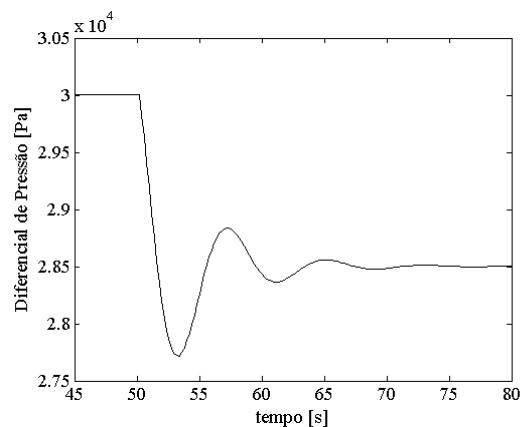


Figura 15 - Diferencial de pressão entre o regenerador e o vaso separador (caso 3).

5. Conclusões

Um modelo dinâmico de um conversor de craqueamento catalítico fluidizado foi desenvolvido. O modelo do conversor compreende três componentes principais: o elevador, o vaso separador/retificador e o regenerador. Pelo fato do tempo de permanência do catalisador no elevador ser muito menor que nos demais componentes, seu comportamento é assumido como quase-estático. As propriedades no vaso separador são assumidas uniformes e o regenerador é composto de uma região densa com duas fases. Os princípios de conservação da quantidade de movimento, da energia e da massa dão origem a equações diferenciais ordinárias. No elevador, a dependência é em relação a altura e nos demais componentes a dependência é em relação ao tempo. As equações do elevador são resolvidas pelo método das diferenças finitas enquanto que as demais são solucionadas pelo método de Runge-Kutta de quarta ordem.

Uma análise de sensibilidade do critério de convergência e da malha no elevador, bem como do passo de tempo das equações do regenerador e do vaso separador/retificador foi realizada. Um critério de convergência de 0,1% (resíduos relativos para as equações de conservação) e uma malha de 72 pontos se mostraram satisfatórios para as equações de conservação do elevador. A solução das equações dependentes do tempo apresentou instabilidades para um passo tempo maior do que 0,2s. Estas instabilidades são típicas de um método explícito como o de Runge-Kutta de quarta ordem. Os resultados com um passo de tempo de 0,2s mostraram-se independentes do passo de tempo.

Uma comparação com valores experimentais de uma planta piloto de FCC também foi realizada e os resultados apresentam-se promissores. Refinamentos nos modelos de cinéticas do elevador, bem como a inclusão da região diluída no modelo do regenerador devem contribuir para melhorar a concordância com os resultados experimentais. Uma comparação mais extensa com valores experimentais deverá ser conduzida, principalmente em relação às classes de produtos na saída do elevador.

As potencialidades do modelo do conversor são exploradas através de simulações que utilizam um algoritmo de controle para ajustar uma determinada condição de funcionamento da planta. Respostas dinâmicas são analisadas através da aplicação de três distúrbios em variáveis controladas. Conclui-se então que o modelo, altamente não-linear, demonstra ter potencial para ser utilizado por um algoritmo de controle multi-variável, já que respondeu de forma coerente aos distúrbios provocados nas três simulações apresentadas.

6. Agradecimentos

Os autores agradecem à PETROBRAS que, junto com a FINEP/CTPetro, financiaram o projeto OCUC (Otimização e Controle de Unidades de Craqueamento Catalítico). Agradecimentos também à Agência Nacional do Petróleo – ANP – e a Financiadora de Estudos e Projetos – FINEP – através do Programa de Recursos Humanos da ANP para o Setor de Petróleo e Gás – PRH/MCT.

7. Referências

Abadie, E., 1997, “Craqueamento Catalítico”, Relatório SEREC/CEN-SUD, RJ.

- Arbel, A., Huang, Z., Rinard, H., Shinnar, R., 1995, "Dynamic and Control of Fluidized Catalytic Crackers. Modeling of the Current Generation of FCC's", *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 34, 1228-1243.
- Ellis, R. C., Riggs, J. B., 1998, "Modeling and Optimization of a Model IV Fluidized Catalytic Cracking Unit", *AIChE Journal*, v. 44, 9, 2068 – 2079.
- Erthal, R.H., 2003, "Modelagem e Simulação Dinâmica de um Conversor de Craqueamento Catalítico", Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais, CEFET-PR, Curitiba-PR.
- Han, I. S., Chung, C. B., 2000, "Dynamic Modeling and Simulation of a Fluidized Catalytic Cracking Process. Part I: Process modeling", *Chemical Engineering Science*, v. 56, 1951-1971.
- Jacob, S. M. Weekman, V. W., 1976, "A Lumping and Reaction Scheme for Catalytic Cracking", *AIChE Journal*, v. 22(4), p701 –713.
- Lansarin, M. A., 1997, "Modelagem e Simulação da Seção de Conversão de uma Unidade FCC", 1997, Tese de Doutorado em Engenharia Química, UNICAMP, Faculdade de Engenharia Química, Campinas-SP.
- Martignoni, W. P., 2000, "Desenvolvimento de Modelagem e Simulação de *Risers* de FCC Modelo 1-D", Relatório PETROBRAS.
- McFarlane, R. C. Reineman, R. C., Bartee, J. F., Georgakis, C. 1990, "Dynamic Simulator for a Model IV Fluid Catalytic Cracking Unit", *AIChE, Annual Meeting*, Chicago, Illinois.
- Penteado, J. C., 2003, Modelagem Dinâmica do Regenerador de uma Unidade de Craqueamento Catalítico, Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais, CEFET-PR, Curitiba-PR.
- Santos, M., 2000, "Modelo Dinâmico para o Controle do Conversor de uma Unidade de FCC UOP STACKED", Dissertação de Mestrado em Engenharia Química, Departamento de Engenharia Química, UFRGS, Porto Alegre-RS.
- Yang, W., 1978, "Correlation for Solid Factor in Vertical Pneumatic Conveying Lines", *AIChE Journal*, v. 24, n.3, p. 548–552.

DYNAMIC MODELING AND SIMULATION OF A FLUID CATALYTIC CRACKING CONVERTER

Abstract. *The current work presents a dynamic model of a fluid catalytic cracking unit (FCC). The main three components of the FCC are included in the modeling: riser, separator vase/stripper and regenerator. A 4-lump model represents the kinetics of the reactions and the gas-solid flow is considered one-dimensional and quasi-steady. The thermophysical properties are considered uniform along the separator vase/stripper and the regenerator. The regenerator is composed of a dense region that comprises two phases. The conservation principles of momentum, energy and mass are employed, providing a set of ordinary differential equations. The riser equations are solved by the finite difference method and the equations of the separator vase/stripper and the regenerator are solved by the 4th order Runge-Kutta method. Sensitivity analysis of the convergence criteria and mesh resolution for the riser equations and time-step for the other equations is conducted. The results were also compared to experimental data showing they are quite promising. Case studies are also performed in order to verify the dynamic response of the model. Some controlled variables are submitted to step changes and Proportional-Integral control actions are employed to adjust the plant to its new operating condition.*

Keywords. *FCC, dynamic modeling, control action*