



Simulação da deposição de coque em coletor de líquido de gásóleo residual usando fluidodinâmica computacional

Julio Cesar Carvalho Venancio

Rodrigo Bernardo Medeiros

Projeto Final de Curso

Orientadores

Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc.

Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.

Agosto de 2010

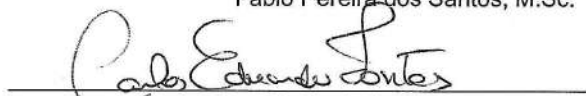
SIMULAÇÃO DA DEPOSIÇÃO DE COQUE EM COLETOR DE LÍQUIDO DE GASÓLEO RESIDUAL USANDO FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

Julio Cesar Carvalho Venancio
Rodrigo Bernardo Medeiros

Projeto de Final de Curso submetido ao Corpo Docente da Escola de Química,
como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Engenheiro
Químico.

Aprovado por:


Fábio Pereira dos Santos, M.Sc.


Carlos Eduardo Fontes, D.Sc.


Prof. Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D

Orientado por:


Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc.


Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.

Rio de Janeiro, RJ – Brasil

Agosto de 2010

Venancio, Julio C. Carvalho; Medeiros, Rodrigo Bernardo.

Simulação da deposição de coque em coletor de líquido de gásóleo residual usando fluidodinâmica computacional / Julio Cesar Carvalho Venancio e Rodrigo Bernardo Medeiros. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2010.

xiii, 52 p.; il.

(Projeto) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2010.
Orientadores: Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage e Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva.

1. Deposição de Coque. 2. Gásóleo Residual. 3. Fluidodinâmica Computacional. 4. Projeto. (Graduação – UFRJ/EQ). 5. Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage e Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva. I. Simulação da deposição de coque em coletor de líquido de gásóleo residual usando fluidodinâmica computacional.

Julio:

Agradeço aos meus pais pelo incentivo e pelos inúmeros sacrifícios feitos para tornar possível esse momento. Agradeço a minha irmã, tios e tias pela motivação para continuar trilhando essa carreira.

Por fim, dedico aos novos e velhos amigos com os quais pude compartilhar momentos de tristeza e de alegria, fazendo da EQ um ambiente menos sofrível e saudoso.

Rodrigo:

Agradeço primeiramente a minha mãe por todas as vezes que ela me mandava parar de jogar para estudar, o que foi um grande investimento, perdeu um jogador de futebol e ganhou um engenheiro.

Agradeço também aos meus irmãos pelo apoio constante, principalmente na decisão de cursar Engenharia química.

E finalmente a memória de meu pai que não pode estar presente neste momento, mas que com certeza está olhando por mim de algum lugar.

Saudades meu velho.

Agradecimentos

À ESCOLA DE QUÍMICA

-Pelo aprendizado, o qual permitiu nossa formação acadêmica e pela oportunidade que nos foi dada de conhecer pessoas maravilhosas.

AOS PROFESSORES PAULO LARANJEIRA DA CUNHA LAGE E LUIZ FERNANDO LOPES RODRIGUES SILVA

-Pelo apoio, companheirismo e pela orientação fornecida para a elaboração deste projeto.

AO FÁBIO PEREIRA DOS SANTOS

-Pela grande ajuda em diversos momentos, nos quais precisamos de auxílio para o desenvolvimento da pesquisa.

AO LABORATÓRIO DE TERMOFLUIDODINÂMICA (LTFD)

-Por nos ter fornecido as instalações e condições necessárias para que pudéssemos executar este trabalho.

Resumo do Projeto Final de Curso apresentado à Escola de Química / UFRJ como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Engenheiro Químico.

SIMULAÇÃO DA DEPOSIÇÃO DE COQUE EM COLETOR DE LÍQUIDO DE GASÓLEO RESIDUAL USANDO FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

Julio Cesar Carvalho Venancio
Rodrigo Bernardo Medeiros

Agosto, 2010

Orientadores: Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage
Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva

A unidade de destilação é uma das operações unitárias mais críticas e complexas do processo de refino do petróleo. Com o aumento do interesse no processamento de óleos compostos por hidrocarbonetos de alto peso molecular que são menos valorizados resulta na operação da unidade de destilação em condições cada vez mais severas de temperatura e pressão. Esta situação favorece a formação de subprodutos indesejáveis, dentre eles, o coque figura como uma das principais causas do mau funcionamento de unidades de destilação. Por conta disto é interessante o estudo do comportamento e quantidade do coque formado, assim como vias de diminuição de sua formação.

Em estudo anterior, um modelo cinético simplificado foi utilizado para estimar a formação de coque a partir de asfaltenos. Simulações fluidodinâmicas tridimensionais em escala real considerando transferência de calor foram feitas, porém considerando somente o escoamento da fase líquida. O modelo utilizado no trabalho anterior determinou a taxa volumétrica de formação de coque na fase líquida em cada ponto do domínio, porém este modelo desconsiderava o movimento das partículas de coque após sua formação.

Este trabalho tem como objetivo analisar a deposição de coque em um prato coletor de líquido de gasóleo residual de uma unidade de destilação a vácuo utilizando fluidodinâmica computacional (CFD), por meio do software comercial ANSYS CFX 12.0. Uma simulação estacionária com descrição Lagrangeana-Euleriana de via única do movimento das partículas no coletor foi conduzida utilizando os resultados da taxa

volumétrica de formação de coque e o campo pseudo-estacionário de velocidade do fluido obtidas no trabalho anterior.

Uma rotina em FORTRAN foi implementada para injetar as partículas em cada nó da malha com a taxa mássica correspondente à massa de coque formado no respectivo volume de controle. Foi feita também a análise de sensibilidade alterando o diâmetro de partícula assim como o coeficiente de restituição partícula-parede. O modelo foi capaz de simular as regiões onde as partículas tendem a acumular.

Abstract of a Final Project presented to Escola de Química / UFRJ as partial fulfillment of the requirements for the degree of Chemical Engineer.

SIMULATING COKE DEPOSITION IN THE SLOP WAX COLECTOR USING COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS

Julio Cesar Carvalho Venancio
Rodrigo Bernardo Medeiros

August, 2010

Supervisors: Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage
Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues da Silva

The distillation unit is one of the most critical and complex unit operations of the refining process. Due to the increased interest in heavy and underrated oil processing, the distillation unit is operated in more aggressive conditions of temperature and pressure. This favors the formation of byproducts and, among them, coke figures as a major cause of the malfunction of these units. Therefore, it is interesting to study the behavior and amount of coke formed, as well as the possible ways of reducing its formation.

In a previous work, a simplified kinetic model was used to estimate the coke formation from asphaltenes. The three-dimensional CFD simulations with heat transfer were carried out in the actual scale of the collector, but considering only the flow of the liquid phase. The model used in previous work could determine the mean volumetric rate of coke formation at each point in the domain but this model did not consider the movement of the coke particles after their formation.

The aim of this study was to analyze coke formation and deposition in a slop wax collector of a vacuum distillation column by computational fluid dynamics (CFD), using the commercial software ANSYS CFX 12.0. A one-way Lagrangian-Eulerian steady-state simulation of coke particles movement in the collector was carried out using the results of the mean volumetric rate of coke formation and the quasi-steady liquid velocity fields from the previous work simulations.

A FORTRAN user routine was implemented into ANSYS CFX 12.0 to inject a particle at each mesh node with the mass flow rate corresponding to the coke mass formation rate at the corresponding control volume. A sensitivity analysis was made

regarding the coke particle size and particle-wall restitution factors. The model was able to simulate the regions where the particles tend to accumulate.

Índice

INTRODUÇÃO	1
1.1. DESTILAÇÃO	2
1.1.1. <i>Destilação Atmosférica</i>	3
1.1.2. <i>Destilação a Vácuo</i>	5
1.2. COQUE	7
1.3 CFD (COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS)	8
1.4. OBJETIVOS	9
1.5. ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO	10
REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	11
2.1. PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS DO COQUE	11
2.2. COEFICIENTE DE RESTITUIÇÃO	14
2.3 UTILIZAÇÃO DE CÓDIGOS EM FORTRAN NO SOFTWARE CFX	15
2.3.1. <i>Linguagem FORTRAN</i>	15
2.3.2. <i>Aplicação do FORTRAN no CFX</i>	15
2.3.3. <i>Junction Box</i>	16
2.4. APLICAÇÕES DA TÉCNICA DE CFD	16
2.5. PERFIL DE FORMAÇÃO DE COQUE NO COLETOR DE GASÓLEO RESIDUAL	17
2.6. DESCRIÇÃO DA EVOLUÇÃO DAS VARIÁVEIS DE UM FLUIDO	18
2.6.1. <i>Descrição da abordagem Euleriana</i>	18
2.6.2. <i>Descrição da abordagem Lagrangeana</i>	19
2.6.3. <i>Acoplamento via única Lagrangeana-Euleriana para rastreamento das partículas</i>	20
METODOLOGIA NUMÉRICA	21
3.1. MODELO GEOMÉTRICO	21
3.2. GERAÇÃO DA MALHA	22
3.3. MODELO CINÉTICO DO COQUE	23
3.4. CONDIÇÕES DE CONTORNO E INICIAIS	23
3.5. ESTRATÉGIA DE SOLUÇÃO	25
3.6. DESCRIÇÃO DA EVOLUÇÃO DE UM FLUIDO	27
RESULTADOS E DISCUSSÕES	29
4.1. TESTE DE SENSIBILIDADE DA MALHA	29
4.1.1. <i>Comparação dos resultados das simulações em diferentes intervalos de tempo e distância.</i>	30
4.1.2. <i>Comparação dos resultados entre malhas de diferentes tamanhos.</i>	34
4.2. TESTE DE SENSIBILIDADE À VARIAÇÃO DE PARÂMETROS	38
4.2.1. <i>Sensibilidade com relação ao diâmetro</i>	38
4.2.2. <i>Sensibilidade com relação ao coeficiente de restituição</i>	41
4.3. COMPARAÇÃO FORMAÇÃO X DEPOSIÇÃO DE COQUE.	45
CONCLUSÃO	48
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	50

Índice de Figuras

Figura 1 - Representação da unidade de destilação atmosférica [21].	3
Figura 2 - Representação da unidade de destilação a vácuo [21].	6
Figura 3 - Representação do modelo geométrico do prato coletor de gasóleo [5].	22
Figura 4 - Representação das condições de contorno do problema.	25
Figura 5 - Representação das linhas utilizadas para comparação entre malhas.	31
Figura 6 – Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 1 para malha 2.	32
Figura 7 – Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 2 para malha 2.	32
Figura 8 – Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 3 para malha 2.	33
Figura 9 – Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 4 para malha 2.	33
Figura 10 – Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 1 para as malhas 1 e 2.	35
Figura 11 – Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 2 para as malhas 1 e 2.	36
Figura 12 – Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 3 para as malhas 1 e 2.	36
Figura 13 – Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 4 para as malhas 1 e 2.	37
Figura 14 – Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 1 para análise de sensibilidade ao diâmetro para malha 2.	39
Figura 15 – Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 2 para análise de sensibilidade ao diâmetro para malha 2.	39
Figura 16 – Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 3 para análise de sensibilidade ao diâmetro para malha 2.	40
Figura 17 – Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 4 para análise de sensibilidade ao diâmetro para malha 2.	40
Figura 18 - Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 1 para análise de sensibilidade ao coeficiente de restituição para malha 2.	41
Figura 19 - Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 2 para análise e sensibilidade ao coeficiente de restituição para malha 2.	42
Figura 20 - Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 3 para análise de sensibilidade ao coeficiente de restituição para malha 2.	42
Figura 21 - Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 4 para análise e sensibilidade ao coeficiente de restituição para malha 2.	43
Figura 22 - Perfil de formação de coque obtido em [5].	45
Figura 23 - Perfil de velocidade [5].	46
Figura 24 - Perfil de deposição de coque no fundo do prato coletor.	47

Índice de Tabelas

Tabela 1 - Condições de contorno do problema.....	24
Tabela 2 - Configurações da partícula de coque.....	25
Tabela 3 - Número de nós das malhas 1 e 2.	29
Tabela 4 - Balanço de massa para diferentes tempos de rastreamento para malha 1	34
Tabela 5 – Balanço de massa para diferentes tempos de rastreamento para malha 2	34
Tabela 6 - Balanço de massa para as partículas de coque comparando malhas 1 e 2....	37
Tabela 7 - Definição das condições analisadas de sensibilidade para diâmetro e coeficiente de restituição para malha 2.....	38
Tabela 8 – Cálculo do balanço de massa para análise de sensibilidade com relação ao diâmetro e coeficiente de restituição da malha 2.	44

Capítulo 1

Introdução

O petróleo é uma mistura de centenas de diferentes espécies químicas. A maioria destes compostos são hidrocarbonetos, especialmente parafinas, naftênicos, aromáticos ou combinações destes compostos. Além dos hidrocarbonetos existe uma gama de compostos formados por enxofre, nitrogênio e sais. Em sua maioria, estes compostos são poluentes, corrosivos e podem até mesmo envenenar os catalisadores utilizados durante as etapas do refino.

Desta forma, a tendência é que as refinarias prefiram trabalhar com óleos que apresentem os menores índices destes compostos. Portanto, reservas de óleos com menores teores de impurezas são priorizadas em detrimento daquelas que possuem altos índices destes contaminantes.

Devido à distribuição referente ao comprimento de cadeia dos hidrocarbonetos presentes no petróleo e suas diferentes composições, as propriedades físico-químicas dos óleos crus variam amplamente. Estas diferenças que determinam a maneira como estes óleos serão processados.

Os óleos pesados têm como características altas viscosidades, quantidades maiores de contaminantes e sais, acidez mais elevada, menor estabilidade térmica e um resíduo de carbono mais elevado. Devido a estas características, estes óleos foram, por muito tempo, pouco utilizados e tiveram seus preços depreciados no mercado.

É uma realidade que as refinarias atuais são extremamente deficientes quanto ao processamento de óleos pesados, que por muito tempo foram evitados, mas com a redução nas reservas de óleos mais nobres, o seu uso vem se tornando cada vez mais inevitável. O principal aspecto a ser considerado no projeto de uma refinaria é deixá-la

apta ao processamento de óleos mais pesados sem que tais adaptações elevem os custos de tal maneira que o projeto se torne inviável

Na indústria de processamento de petróleo, a coluna de destilação é uma das principais operações unitárias. Estas torres de destilação operam sob condições rigorosas. São poucas as refinarias projetadas para o processamento de óleos pesados puros. Dependendo do óleo a ser processado, estas unidades necessitam passar por adaptações para que aspectos como rendimento e qualidade dos produtos obtidos não sejam notados pelos consumidores.

1.1. Destilação

A operação unitária de maior interesse e importância para o processo de refino de petróleo é a destilação. Esta é uma operação intensiva em energia e, quando eficiente, garante grande retorno econômico.

A base teórica para o cálculo de colunas de destilação vem sendo estabelecida há décadas. Uma coluna de destilação consiste de uma série de estágios interligados onde se pretende atingir o equilíbrio líquido-vapor. Idealmente, o líquido e o vapor que deixam cada estágio estão em equilíbrio. O vapor entra no próximo estágio superior onde estabelece um novo equilíbrio, tal como o líquido que passa para o próximo estágio inferior também estabelece um novo equilíbrio e, assim, sucessivamente.

Com isto, os componentes mais leves da mistura deixam a coluna como produtos de topo e os componentes mais pesados saem como produto de fundo. Como a separação não é perfeita obtém-se os produtos com diferentes faixas de composição.

A retirada de produtos laterais é amplamente utilizada no processo de refino do petróleo já que o objetivo é obter determinadas faixas de composição, como a nafta, a querosene, o GLP entre outros.

No processo de refino há dois tipos de destilação, a destilação atmosférica e a destilação a vácuo. Estes dois processos estão descritos na seqüência.

energética. Pelo lado dos produtos, estes permutadores de calor têm como objetivo retirar calor da torre. Após o pré-aquecimento, água é injetada resultando em uma emulsão que vai à dessalgação.

Nesta etapa, o cru é pré-tratado para retirar o sal, principalmente cloretos, por meios eletromagnéticos ou de diluição nas dessalgadoras. A dessalgação faz então a separação da carga emulsionada, onde os sais migram seletivamente para a fase aquosa sendo retirados posteriormente.

Depois da dessalgação, o óleo é aquecido até a temperatura ideal para entrar na coluna no forno de aquecimento de cru. O óleo quente vindo do forno é bombeado através da tubulação até a zona de *flash* na coluna atmosférica. Então ele se mistura com o vapor e os hidrocarbonetos mais leves vindos do fundo da coluna. Vapor suficiente é aquecido e introduzido no fundo da coluna para remover os hidrocarbonetos mais leves do produto de fundo, aumentando a eficiência. O vapor injetado, também diminui a pressão parcial de vapor dos hidrocarbonetos na zona de *flash*. Esta diminuição da pressão parcial para os hidrocarbonetos diminui a temperatura necessária para destilar os produtos de topo [21]. O líquido quente vindo da zona de *flash* vai para o fundo onde é aquecido pelo vapor injetado.

O vapor aquecido vindo da zona de *flash* ascende e entra em contato com o refluxo que flui coluna abaixo a partir do topo. O refluxo condensa os produtos que são retirados lateralmente da coluna. O refluxo é proveniente do condensador de topo e do refluxo bombeado lateralmente.

A utilização de circuitos de bombeamento laterais é considerada como artifício para que haja remoção do calor latente dos vapores da zona de *flash* e auxílio na condensação dos produtos laterais. Além disso, aumenta-se a eficiência dos trocadores de calor para o pré-aquecimento do óleo cru, pois permite a recuperação a níveis mais altos de temperatura, o que diminui o calor necessário no forno de aquecimento de cru.

A etapa de destilação atmosférica separa a carga em seus destilados à pressão atmosférica. Pelo topo são retirados gás combustível e nafta, que pode ser leve ou pesada dependendo se houve ou não pré-fracionamento. No caso de ocorrer o pré-fracionamento, o cru passa por uma torre de fracionamento chamado de torre de pré-*flash* onde são retirados os componentes leves do petróleo, o gás liquefeito de petróleo (GLP) e nafta leve. Então o produto de fundo desta torre é encaminhado para o forno de aquecimento. A inclusão desta etapa propicia a diminuição do tamanho da torre

atmosférica e a economia de combustível no forno de aquecimento, portanto é necessário fazer um bom estudo para inclusão ou não desta etapa no processo, dependendo da composição do cru que virá a ser processada. Lateralmente da coluna, as principais frações podem ser obtidas: querosene, diesel leve e o diesel pesado. No fundo da torre é retirado o cru não vaporizado, que é chamado de resíduo atmosférico. Este resíduo segue para a destilação a vácuo, onde será feita uma destilação a pressões mais baixas que a atmosférica a fim de utilizar menos energia, conseguindo destilar faixas mais pesadas a temperaturas não tão críticas, evitando a decomposição dos compostos orgânicos.

1.1.2. Destilação a Vácuo

A destilação a vácuo é a continuação da destilação atmosférica. O resíduo de fundo da destilação atmosférica é aquecido em um forno e destilado a pressões inferiores à pressão atmosférica para recuperar destilados adicionais e gasóleo.

A pressão de operação mais baixa permite a extração desses materiais do resíduo atmosférico sem o uso de temperaturas excessivas, isto reduz a formação de compostos de metais e carbono no produto [21].

Existem basicamente duas formas de realizar a destilação a vácuo em refinarias. A mais comum extrai o gasóleo que servirá como carga para as unidades de craqueamento, onde será convertido em gases e líquidos leves, gasolina e óleo combustível. A segunda forma extrai frações do petróleo a partir do produto de fundo da unidade de destilação atmosférica desejável para a produção de óleo lubrificante.

Na seqüência é possível visualizar a representação de uma unidade de destilação a vácuo, por meio da Figura 2 bem como a descrição, de maneira genérica, do processo.

As colunas de destilação a vácuo são projetadas para recuperar o máximo possível de gasóleo proveniente do resíduo de fundo da destilação atmosférica. O interesse de separação de uma unidade de destilação a vácuo operando no modo de recuperação de gasóleo é a separação entre o resíduo de vácuo e o gasóleo pesado. Sendo que esta separação ocorre na zona de flash da coluna e é controlada pela temperatura e pressão nesta zona. A temperatura e pressão da zona de flash são determinadas a partir das características de vaporização do resíduo de fundo da destilação atmosférica.

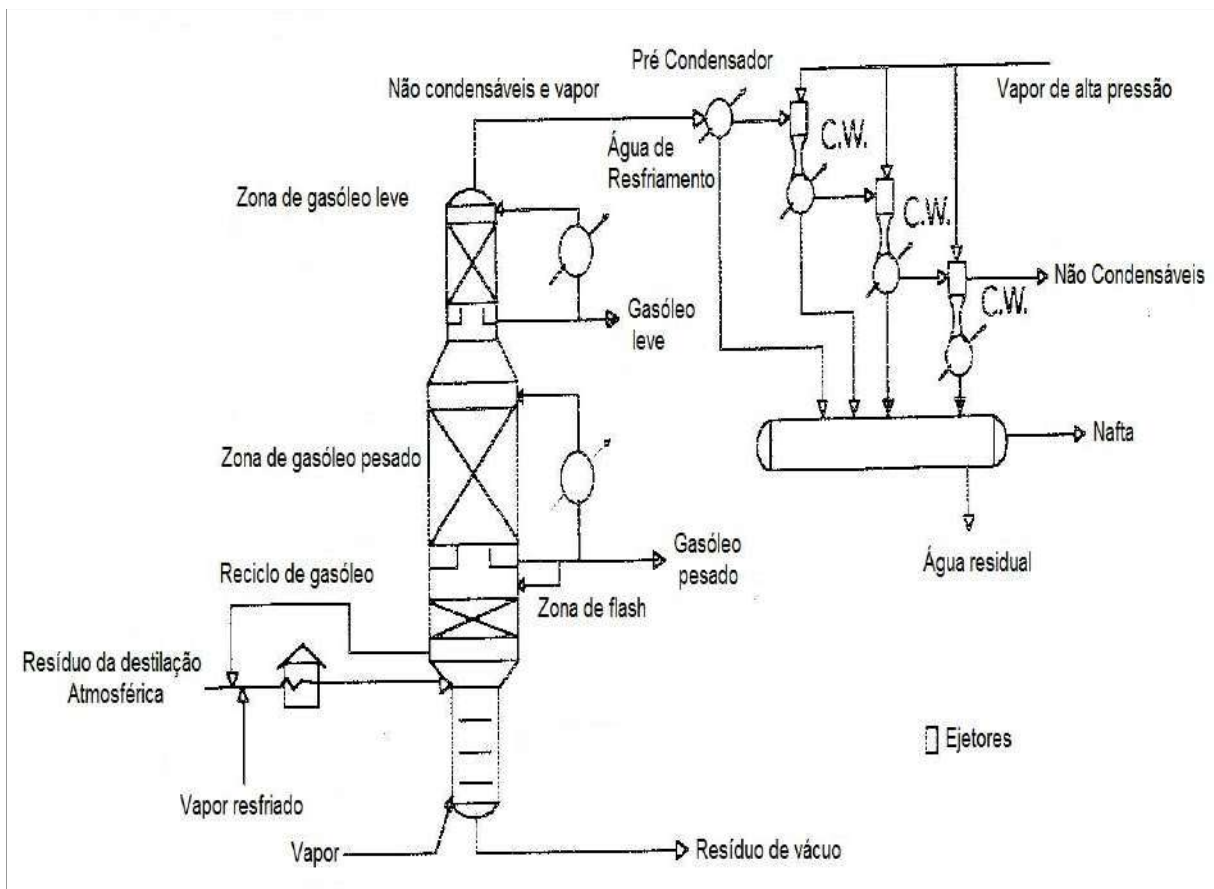


Figura 2 - Representação da unidade de destilação a vácuo [21].

Tipicamente as unidades de operação a vácuo podem ser decompostas em operações secas e úmidas. Estas operações são similares, exceto que a unidade úmida utiliza vapor para reduzir a pressão parcial dos hidrocarbonetos na zona de flash ao nível desejado, enquanto que a unidade a seco conta com um refrigerador que resfria parte do resíduo de fundo para minimizar formação de coque diminuindo também a pressão parcial de vapor dos hidrocarbonetos. Ambas a unidades utilizam ejetores de vapor para produzir vácuo e produzem água condensada que precisa ser tratada.

É nesta etapa do refino que é possível obter ganhos marginais, através da otimização da recuperação de gásóleo de cargas pesadas, as quais têm preços depreciados, mas para tal é necessário fazer investimentos volumosos.

Na unidade de destilação a vácuo, a seção de óleo de lavagem é a seção mais crítica que influencia no desempenho [5]. Esta seção está localizada acima da zona de vaporização, trabalhando com quantidades grandes de vapor superaquecido e pouco líquido. A função desta seção é remover asfaltenos e compostos organo-metálicos do vapor da carga a partir do contato com o refluxo de gasóleo pesado. Abaixo há um prato coletor de gasóleo líquido residual que é responsável por coletar o líquido que deixa a seção de lavagem. Neste prato ocorrem condições críticas de temperatura o que intensifica a formação de coque. O projeto da seção de óleo de lavagem deve estimar uma vazão mínima adequada de óleo para garantir a qualidade do gasóleo pesado minimizando o efeito de coqueamento

A incidência de formação de coque em colunas de destilação a vácuo está geralmente associada aos seguintes fatores: temperatura do vapor, distribuição do óleo de lavagem, composição do vapor e arraste do líquido. Ao longo da coluna os pontos com maiores taxas de formação de coque são o leito, o distribuidor e o prato coletor do óleo de lavagem [5].

1.2. Coque

Devido sua complexidade, o petróleo pode ser decomposto em quatro frações básicas, sendo estas: os asfaltenos, saturados, aromáticos e as resinas. Durante a decomposição térmica, a fração asfaltênica do petróleo é que produz níveis mais elevados de coque e por isso vem recebendo atenção especial [2]. O coque pode ser classificado como um material carbonáceo, insolúvel em solventes aromáticos. A produção de resíduos obtidos em processos catalíticos e térmicos está fortemente associada às concentrações de asfaltenos presentes nas correntes de alimentação de óleos crus [3].

Visto desta maneira, os asfaltenos podem ser considerados os maiores contribuintes para a formação de depósitos em equipamentos da refinaria [4]. Deste coque formado, têm-se as implicações às operações das unidades.

As principais conseqüências da deposição de coque nessas colunas são o aumento da perda de carga, menor rendimento na produção de gasóleos e a interrupção não programada da unidade, o que gera aumento nos custos de processamento [5, 6]. De

um levantamento realizado a partir de relatos feitos sobre o mau funcionamento em torres de refinarias distribuídas pelo mundo, desde a década de 50, o coqueamento foi apontado como causa de paradas não programadas em 13% dos casos apresentados [7].

Estudos encontrados na literatura [2, 3, 4] foram capazes de apontar os aspectos para a formação de coque. A composição da carga processada e as condições operacionais das unidades são fatores determinantes [8].

1.3 CFD (Computational Fluid Dynamics)

A fluidodinâmica computacional (CFD) pode ser resumida como um conjunto das técnicas de simulação computacional utilizadas para prever os fenômenos físicos ou físico-químicos que ocorrem em escoamentos através da análise de sistemas envolvendo escoamento de fluidos, transferência de calor e massa além de outros fenômenos mais específicos, como reações químicas, por exemplo, em um domínio pré-definido que represente o problema estudado.

Com isso, as técnicas de CFD têm aplicabilidade extremamente vasta, passando por diversas áreas, como indústria automobilística, indústrias químicas, petroquímicas e muitas outras. O grande ganho da utilização de CFD é o nível de detalhamento da solução obtida quando em comparação com simuladores de processo. Enquanto que os simuladores de processo geralmente definem condições específicas como, por exemplo, a temperatura de uma corrente de vapor sem levar em conta a geometria do problema, a fluidodinâmica computacional define todo o perfil de temperatura da corrente através da solução das equações de fenômenos de transporte em um volume de controle definido, no caso uma representação tridimensional da tubulação. Isto torna a representação de problemas em CFD muito mais próximas da realidade.

A solução de um problema por CFD têm 3 etapas principais, a primeira é o pré-processamento, a segunda é a solução das equações governantes do problema de acordo com as definições feitas no pré-processamento e por último a representação dos resultados no pós-processamento, o que inclui construção de gráficos 2D, 3D, planos representativos, perfis de distribuição de alguma variável específica entre outros.

O pré-processamento consiste na definição do problema a ser resolvido e estudado, isto envolve as seguintes etapas:

- Definição da geometria da região a ser estudada (o domínio computacional).
- Geração da malha, que consiste na divisão da geometria do problema em subdomínios menores.
- Seleção de fenômenos físico-químicos que devem ser modelados.
- Definição das propriedades do fluido, partículas e etc.
- Especificação das condições de contorno do problema .

Feitas essas definições, é possível iniciar o procedimento de solução do problema. Este procedimento consiste na aplicação de técnicas numéricas para resolver as equações governantes do problema, como equações de conservação de massa, energia e quantidade de movimento.

Uma vez obtida a solução do problema, o pós-processamento é utilizado como ferramenta para visualização desses resultados.

Atualmente, existe uma série de softwares desenvolvidos para todas as etapas da solução de um problema CFD, dentre eles os mais difundidos são o CFX e o FLUENT, desenvolvidos pela ANSYS. O CFX é dividido em 3 partes, CFX Pre, CFX Solver e CFX Post, destinados as etapas de pré-processamento, solução do problema e pós-processamento respectivamente.

O CFX apresenta uma interface com o usuário muito bem desenvolvida e de fácil utilização, além disso, oferece também a possibilidade de adicionar equações e variáveis específicas para cada problema através da pseudo linguagem CEL (CFX Expression Language). Neste trabalho foi utilizado o software ANSYS CFX 12.0.

1.4. Objetivos

Este trabalho tem como objetivo avaliar a deposição de partículas de coque, originalmente formadas no interior de um coletor de líquido de gásóleo residual (GOR) de uma unidade de destilação a vácuo pela técnica de CFD. Para tal estudo, foram utilizados

os resultados obtidos por SANTOS [5], onde foi realizada a simulação do escoamento tridimensional e transiente em geometria de tamanho real, desconsiderando o período de indução e o arraste de coque pelo fluido.

A reação de formação de coque é oriunda de reações de condensação e polimerização dos compostos aromáticos presentes nos óleos [2]. No trabalho utilizado como referência [5], foi empregado um modelo cinético simplificado, onde as reações de formação de coque são consideradas de primeira ordem [5, 9].

A utilização da técnica de CFD para este trabalho é a oportunidade que se tem de analisar a fluidodinâmica, com base na geometria original do coletor. Com este propósito, a técnica de CFD é muito útil para proposição de alterações na geometria do problema e servir de base para projetos experimentais e de *scale-up*.

1.5. Organização do trabalho

Este trabalho está estruturado em cinco capítulos, contando com a presente introdução, descrevendo a motivação para o presente trabalho, as principais etapas das unidades de destilação, o problema relacionado à formação de coque nas fracionadoras, a utilização de técnicas de CFD, o objetivo e a organização do trabalho.

O Capítulo 2 apresenta uma revisão bibliográfica a respeito das propriedades físico-químicas do coque, sobre o coeficiente de restituição de partículas, sobre CFD aplicado ao tema em questão, sobre a aplicação de rotinas em FORTRAN no *software* CFX, sobre as formas de evolução das variáveis de um fluido e sobre o trabalho que serviu como base para o desenvolvimento deste.

No Capítulo 3 é descrita a metodologia numérica do trabalho: modelo geométrico, condições de contorno iniciais, descrição das malhas, critério de convergência usado para a simulação e estratégia de solução do problema.

Para o Capítulo 4 estão apresentados os resultados do teste de convergência de malha, teste de convergência entre malhas, análise de sensibilidade a parâmetros e comparação dos perfis de formação e deposição de coque sobre o coletor de líquido de gasóleo residual.

Por fim, o Capítulo 5 expõe as conclusões obtidas ao término do trabalho e são propostas algumas sugestões para o desenvolvimento de trabalhos posteriores.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

Neste capítulo serão apresentadas as características físico-químicas das partículas de coque, valores para o coeficiente de restituição para materiais de natureza carbonácea, um detalhamento do trabalho predecessor [5], da aplicação de técnicas de CFD, da implementação de rotinas em FORTRAN e sua utilização no *software* CFX e também serão discutidas maneiras de descrever a evolução das variáveis de um fluido.

2.1. Propriedades físico-químicas do coque

O coque na indústria do petróleo é considerado um grande problema, causando paralisações nas operações de colunas de destilação assim como em outras unidades da refinaria, o que gera prejuízos para a indústria. Ao longo dos anos, pesquisadores vêm buscando conhecer melhor as características deste composto, tentando buscar novas maneiras de minimizar a produção de coque.

Existe atualmente uma larga aplicação do coque na produção de eletrodos usados como anodo na indústria de alumínio, eletrodos de grafite para a fabricação de aço, como combustível na queima de resíduos sólidos em caldeiras usadas para geração de energia e como fonte de energia para fornos da indústria cimenteira.

Além do custo inferior quando comparado ao carvão, o coque possui uma energia específica superior a 32 MJ/kg e baixo teor de cinzas. Na realidade, devido à diversidade na composição e da natureza do óleo cru, temos grandes variações nas características do coque.

A indústria de fabricação de aço e ferro é um ambiente propício para o desenvolvimento de estudos de natureza energética. A enorme quantidade de processos

térmicos justifica análises, avanços e melhorias, o que por menores que sejam podem representar uma economia significativa para a indústria. ERRERA & MILANEZ [11] promoveram uma análise termodinâmica para uma unidade de resfriamento de coque a seco.

Com base nos dados coletados foi possível desenvolver expressões capazes de avaliar a capacidade calorífica específica, entalpia e entropia, as energias físicas e químicas, os índices de formação de material particulado e a perda de massa de coque através das reações químicas, para serem posteriormente comparados aos dados disponíveis na literatura.

O coque entra na unidade de resfriamento a uma temperatura de 1100°C, deve ser resfriado até uma temperatura de 200°C. A partir de medições calorimétricas, os pesquisadores conseguiram estabelecer uma correlação linear entre a temperatura e a capacidade calorífica específica do coque. A equação 2.1 foi obtida [11].

$$C_p(T) = a * T + b \quad (2.1)$$

onde, a capacidade calorífica específica é representada por C_p ($\text{kJ kg}^{-1} \text{K}^{-1}$) e é descrita como função da temperatura em Kelvin, uma vez que SILVA *et al.* [12] foram capazes de demonstrar a significativa dependência da capacidade calorífica com a temperatura, sendo a igual a $0,699 * 10^{-3} \text{ kJ kg}^{-1} \text{K}^{-2}$ e b igual a $0,588 \text{ kJ kg}^{-1} \text{K}^{-1}$. Comparado aos dados amostrados diretamente da unidade, a equação mencionada acima apresentou um coeficiente de determinação (r^2) igual a 0,989.

As propriedades do coque obtido a partir do petróleo tem um impacto muito grande sobre o desempenho do anodo durante o processo de fusão do alumínio.

FENG-QIN *et al.* [13] desenvolveram um estudo a respeito do uso de blendas compostas por diferentes coques de petróleo sob diferentes composições para uso na produção de anodos de alta qualidade que seriam utilizados na eletrólise do alumínio. Foram utilizados três tipos de coque verde, ou seja, sem terem sido calcinados, com diferentes propriedades físicas e impurezas para os testes de bancada. Foram preparadas vinte e duas misturas, com diferentes composições. Destas misturas foram determinadas algumas propriedades. Neste trabalho foram apresentados valores para as

condutividades térmicas das diferentes misturas que apresentaram valores dentro de uma faixa compreendida entre 2,45 e 2,95 W m⁻¹ K⁻¹.

Além das propriedades térmicas deste material, outro ponto importante é a definição das propriedades que permitem definir a dimensão das partículas injetadas.

DYACHOK *et al.* [14] desenvolveram um trabalho cujo foco principal é o estudo da utilização do coque de petróleo com altos teores de enxofre e cinzas como combustível sólido em plantas de sinterização. Neste artigo é possível consultar uma tabela que contém os resultados obtidos de um pequeno estudo conduzido, onde é possível comparar o coque de petróleo aos finos de coque, hulha e antracita. Este estudo definiu que a densidade efetiva de uma partícula de coque varia na faixa de 1.380 a 1.500 kg m⁻³.

Além da densidade efetiva, foi determinado o tamanho médio que uma partícula de coque pode assumir. É admitido que o coque seja resultado de reações de condensação e polimerização, o que o faz ter uma distribuição bem ampla de diâmetros. Tendo isso em vista, foram considerados trabalhos que pudessem fornecer alguma estimativa fundamentada para o diâmetro médio.

GRAY *et al.* [15] verificaram o efeito de pequenas partículas de carbono, com diferentes formas, sobre a formação de coque durante o craqueamento do resíduo que deixa uma coluna de destilação a vácuo operando com óleo árabe pesado.

Neste estudo [15] foram utilizadas esferas de grafite e de carbono mesofásico como matrizes para a deposição de coque, por possuírem tamanho de partícula e composição bem definidas. O ensaio foi realizado utilizando como matéria-prima resíduo de vácuo de óleo árabe pesado (AHVR). A reação para formação de coque foi conduzida em autoclave, onde a matéria-prima, as matrizes e o solvente eram adicionados. Após purga com N₂ e fechamento a uma pressão de 3 MPa, a autoclave foi posta em um banho de areia fluidizada a 430°C por 40 minutos. Após a separação da fase líquida da fase sólida, os materiais filtrados, já secos, foram observados em microscópio eletrônico para observação das partículas formadas após a reação.

Das micrografias obtidas foi possível observar que pequenos núcleos, com aproximadamente 0,3 µm de diâmetro, são os precursores de partículas maiores. Nas micrografias dos ensaios realizados com esferas de grafite como matriz, o diâmetro médio das partículas foi de 38 µm. Para os ensaios com carbono mesofásico, o diâmetro foi de 100 µm. Um ensaio em branco também foi realizado, sendo possível observar partículas com diâmetro médio de 52 µm.

2.2. Coeficiente de Restituição

O coeficiente de restituição é a medida da colisão elástica entre duas partículas ou entre uma partícula e uma parede, e diz respeito ao quanto da energia cinética é perdida após a colisão. Uma colisão perfeitamente elástica tem coeficiente de restituição igual a um, enquanto que um choque inelástico tem coeficiente de restituição zero [16].

É possível definir o coeficiente de restituição como a razão entre as diferenças nas velocidades das duas partículas antes da colisão (v_a) pela diferença das velocidades após o choque (v_s), isto é:

$$e = \frac{v_s}{v_a} \quad (2.2)$$

O coeficiente de restituição deriva da equação do movimento de Newton. No geral, procedimentos experimentais mostram que e não é constante, sendo demonstrada pela literatura [17] que pode ser considerado uma função das propriedades do material, velocidade de impacto e da razão entre as durezas dos materiais. Experimentos mostram que dentre estes a velocidade de impacto apresenta a maior influência sobre o coeficiente de restituição [17]. Estudos desenvolvidos com o intuito de avaliar a dependência do tamanho das partículas com e demonstraram que a variação no diâmetro não tem efeito aparente sobre os resultados [18].

SCHADE *et al.* [19] desenvolveram um equipamento capaz de avaliar o impacto partícula-parede especialmente para combustíveis sólidos pulverizados. Com este equipamento foi possível determinar o coeficiente de restituição e o coeficiente de atrito ao impacto de partículas de carvão em uma parede de aço para diferentes ângulos de incidência e velocidade de impacto.

Os testes foram conduzidos utilizando partículas com diâmetros variando numa faixa entre 150 a 300 μm . Os resultados obtidos após os testes mostraram que para ângulos superiores a 35° o coeficiente de restituição assume valores aproximadamente constantes, iguais a 0,36. Para ângulos menores o coeficiente aumenta chegando a valores superiores a um, justificados devido à baixa rugosidade da parede e pelo formato

irregular da partícula. Para as simulações principais de deposição de coque foi utilizado o valor de 0,36 para o coeficiente de restituição das partículas.

2.3 Utilização de códigos em FORTRAN no software CFX

O CFX oferece ao usuário ferramentas para implementação de formulações específicas de cada problema através da linguagem CEL (CFX expression language). Porém, esta linguagem é limitada basicamente à definição de variáveis adicionais e expressões matemáticas simples. Para formulações mais complexas com utilização de lógicas mais refinadas, é possível utilizar sub-rotinas desenvolvidas em FORTRAN para execução de tarefas especiais que não são normalmente suportadas pela interface com o usuário do CFX.

2.3.1. Linguagem FORTRAN

A linguagem FORTRAN é uma das primeiras linguagens computacionais científicas de alto nível. O nome FORTRAN é derivado de *FORmula TRANslation*, o que indica que a linguagem pretendia começar a traduzir as equações e fórmulas científicas em um código entendido pelo computador. A IBM desenvolveu a primeira versão da linguagem FORTRAN entre 1954 e 1957. Em um momento anterior a esse, os programas de computador eram gerados diretamente em linguagem de máquina (código binário), o que era lento, tedioso e sujeito a muitos erros. Tendo isso em vista, a linguagem FORTRAN foi uma inovação gigantesca.

2.3.2. Aplicação do FORTRAN no CFX

As rotinas em FORTRAN são utilizadas para descrever e modelar alguns fenômenos aos quais o CFX não dá suporte. Existem uma série de sub-rotinas nativas já implementadas que podem ser acessadas no código desenvolvido através da referência de uma biblioteca dinâmica.

2.3.3. Junction Box

As *junction box* são também uma alternativa aos desenvolvimentos das funções em CEL que podem ser acessadas em diversos pontos durante a execução do CFX-Solver. As *junction box* podem ser utilizadas para:

- Entrada e saída de dados
- Monitoramento avançado
- Integração entre CFX e outros *softwares*
- Controle (Ex: definir um critério para término de uma rodada transiente sem ser por limite de iterações)

2.4. Aplicações da técnica de CFD

Uma área de forte aplicabilidade da técnica de CFD em destilação encontra-se em projetos de pratos para melhorar a eficiência e capacidade. WEHRLI *et al.* [24] contribuíram nos projetos de distribuidores de entrada de carga para reduzir o arraste de líquido. Há também aplicação de CFD em projetos de recheios e distribuidores.

Na seção de óleo de lavagem da fracionadora a vácuo, não foram encontrados trabalhos com aplicação de CFD. Porém, PALADINO *et al.* [25] fizeram um estudo utilizando CFD na seção de óleo de lavagem de fracionadoras de coque.

A quantidade de trabalhos destinados ao estudo da formação de coque utilizando a técnica de CFD é consideravelmente pequena. Na fracionadora a vácuo especificamente não foi encontrado nenhum trabalho exceto o desenvolvido por SANTOS [5]. Este trabalho será destacado, pois foi utilizado como ponto de partida para desenvolvimento deste.

2.5. Perfil de formação de coque no coletor de gasóleo residual

SANTOS [5] desenvolveu um estudo que determinou o perfil de formação de coque no coletor de gasóleo residual de uma coluna de destilação a vácuo. Neste trabalho foi considerada a formação de coque a partir de asfaltenos com um modelo cinético simplificado de 1º ordem. No modelo, asfaltenos e coque foram considerados como variáveis adicionais, onde o coque formado era acumulado no domínio em seus pontos de formação sendo feitas as seguintes considerações

- O período de indução do coque não foi considerado no estudo

- A quantidade de asfaleno no coletor de gasóleo residual é muito pequena (aproximadamente 3% do gasóleo) não interferindo no balanço de massa do problema.

O líquido foi considerado incompressível, a turbulência foi considerada pelo modelo SST e o escoamento foi definido como Euleriano por ser monofásico.

Em seus resultados SANTOS [5] mostrou que o problema apresenta característica quase-estacionária. A simulação transiente foi rodada por aproximadamente um tempo de residência de 1000 s. Neste trabalho não foi obtida a convergência entre malhas sendo proposto um refinamento maior a fim de se obter esta convergência. Também foi mostrado que existem várias zonas de recirculação em diferentes lugares do coletor. No entanto, essas zonas de recirculação não criam pontos estagnantes, o que propiciariam a formação de coque, que é formado então devido a presença de pontos quentes.

Foram propostas 3 modificações na geometria do prato coletor afim de analisar a influencia no perfil de formação de coque.

Este estudo serviu como ponto de partida para o desenvolvimento deste, de modo que foram utilizados os perfis de formação de coque assim como os campos de temperatura e velocidade.

2.6. Descrição da evolução das variáveis de um fluido

O estudo de campos em fenômenos de transporte tem como objetivo avaliar a evolução de variáveis de um fluido, tais como: temperatura, concentrações de componentes, velocidade e energia.

Um fluido pode ser modelado como uma série de pequenas partículas fluidas que transladam, rotacionam e deformam. Este é um modelo simples que facilita o entendimento da física de um fluido. Em contrapartida, uma maneira de estudar o fluido é por meio da descrição do movimento das partículas que o compõem.

Tradicionalmente, existem duas maneiras capazes de descrever o movimento das partículas fluidas, a abordagem Lagrangeana e a abordagem Euleriana.

2.6.1. Descrição da abordagem Euleriana

A abordagem Euleriana é mais freqüentemente utilizada porque geralmente origina formulações mais simples. Na verdade, na abordagem Euleriana, a partícula fluida não é acompanhada durante o seu movimento, mas sim, foca-se nas alterações das propriedades do fluido em um domínio fixo no espaço onde o fluido está escoando.

Esta formulação consiste de um campo de velocidade para cada ponto no espaço em um determinado instante de tempo.

$$\underline{v} = v(\underline{z}, t) \quad (2.3)$$

Desta forma, esta descrição não fornece informações suficientes sobre o movimento de cada partícula individualmente, mas sim, dá informação em pontos fixos no espaço.

Neste caso, a aceleração de uma partícula fluida não pode ser calculada como a derivada parcial da velocidade do fluido em função do tempo, pois v representa a velocidade de partículas diferentes que passam no ponto z em diferentes instantes. Porém, o cálculo da aceleração de uma partícula fluida é feito por meio da derivada substantiva $D \cdot / Dt$.

$$\underline{a}(\underline{z}, t) = \frac{D\underline{v}(\underline{z}, t)}{Dt} \quad (2.4)$$

onde,

$$\frac{D\underline{v}}{Dt} = \frac{\partial \underline{v}}{\partial t} + (\underline{v} \cdot \nabla) \underline{v} \quad (2.5)$$

Seguindo esta formulação, as outras variáveis como temperatura e concentração são representadas de forma similar:

$$T = T(\underline{z}, t) \quad (2.6)$$

$$C = C(\underline{z}, t) \quad (2.7)$$

2.6.2. Descrição da abordagem Lagrangeana

Esta descrição consiste em seguir cada partícula fluida, na forma de uma equação para o caminho percorrido por cada partícula. Esta aproximação é tipicamente utilizada para partículas sólidas e corpos rígidos. Na mecânica dos fluidos, essa descrição é particularmente utilizada para fluidos multifásicos, onde partículas sólidas podem ser facilmente seguidas utilizando a formulação Lagrangeana.

Matematicamente, a abordagem Lagrangeana dá a posição de cada partícula x a cada instante de tempo t . Desde que o fluido contenha um número infinito de partículas, cada partícula é selecionada especificando sua posição inicial (\underline{z}_0) . Onde,

$$\underline{z} = \underline{z}(t, \underline{z}_0) \quad (2.8)$$

Nesta descrição, a aceleração de uma partícula fluida é determinada como na cinemática de corpos rígidos, onde $\underline{z} = \underline{z}(t, \underline{z}_0)$ representa a posição de uma mesma partícula no tempo. Logo,

$$\underline{v}(t, z_0) = \frac{dz}{dt} \quad (2.9)$$

$$\underline{a}(t, z_0) = \frac{dv}{dt} = \frac{d^2z}{dt^2} \quad (2.10)$$

Outras propriedades, tais como a evolução da temperatura, e concentração podem ser descritas de forma similar:

$$T = T(t, z_0) \quad (2.11)$$

$$C = C(t, z_0) \quad (2.12)$$

2.6.3. Acoplamento via única Lagrangeana-Euleriana para rastreamento das partículas

As partículas podem apresentar um comportamento de acoplamento bidirecional com a fase contínua ou podem ter um acoplamento de via única. No acoplamento bidirecional as partículas trocam quantidade de movimento com a fase contínua, permitindo que o fluido afete as partículas e vice-versa.

O acoplamento bidirecional é necessário para prever o efeito das partículas no campo da fase fluida, porém para se fazer uma análise desse tipo tem-se um custo computacional muito mais elevado do que considerando o acoplamento de via única. Este último tipo de acoplamento simplesmente prevê a trajetória das partículas como um pós processamento baseado no campo do fluido onde as partículas exercem influência irrelevante na fase contínua.

A escolha entre o acoplamento bidirecional e o acoplamento de via única para as partículas depende da razão entre o fluxo de massa das partículas e o fluxo de massa do fluido. O acoplamento de via única é uma aproximação aceitável com baixas razões entre os fluxos partícula-fluido (CFX-Tutorial [27]) onde as partículas têm uma influência pequena no fluxo do fluido. Se pelo contrário, as partículas influenciarem consideravelmente o fluxo do fluido, é necessário considerar a relação partícula-fluido como acoplamento total.

Capítulo 3

Metodologia Numérica

Este trabalho utilizou os resultados obtidos por SANTOS [5] para a definição das propriedades do fluido. Com isso foi implementada uma rotina em FORTRAN para injetar as partículas em diversos pontos do domínio com taxa mássica devidamente calculada. Para as partículas foi considerado um escoamento Lagrangeano-Euleriano acoplado de via única.

3.1. Modelo Geométrico

Para a recuperação do gasóleo, quando do processamento de cargas mais pesadas, as refinarias costumam operar a torre de destilação a vácuo sob condições bem mais severas. Estas condições de operação mais críticas são apontadas como as principais causas para a maior incidência de formação e depósito de coque no interior da unidade.

O coletor de gasóleo residual é constituído por chaminés, responsáveis pela distribuição do vapor ascendente; calha, que tem como função coletar o líquido dentro da torre e bocal de saída, para remoção do líquido da fracionadora. Com o intuito de minimizar a formação de coque, o projeto deste coletor baseia-se na redução do tempo de residência do líquido, operando em alguns casos quase que secos, com o nível do líquido no interior da calha.

Para a determinação do perfil de velocidade e de temperatura, a formação de coque e sua posterior deposição, a interface de líquido está localizada acima da calha,

numa altura intermediária às chaminés, ou seja, o domínio físico do problema está localizado em torno das chaminés e da calha.

A geometria do problema, apresentada na Figura 3, foi baseada no coletor de gasóleo residual de uma das refinarias da PETROBRAS, gerada em tamanho original e tridimensional. Com 884 cm de diâmetro, o prato coletor conta com dez chaminés com 70 cm de largura, sendo seis centrais com 320 cm de comprimento e quatro chaminés laterais com 200 cm de comprimento. A calha possui 51 cm de altura, 720 cm de comprimento e 56 cm de largura, enquanto que o bocal de saída possui de 14,6 cm de diâmetro.

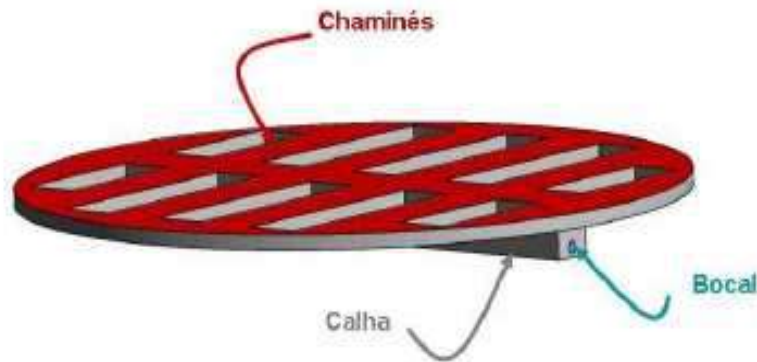


Figura 3 - Representação do modelo geométrico do prato coletor de gasóleo [5]

3.2. Geração da Malha

As malhas desenvolvidas para este trabalho foram não-estruturadas híbridas, ou seja, foram geradas automaticamente, desconsiderando as continuidades das linhas das malhas, sendo compostas por diferentes tipos de elementos: tetraédricos, hexaédricos, prismas e pirâmides.

Para que os gradientes de temperatura e velocidade fossem resolvidos no interior da camada limite foi feito um refinamento com 15 camadas de elementos prismáticos. O tratamento desta região vem do interesse da análise de formação de coque próximo à parede aquecida. Foram geradas malhas com diferentes graus de refinamento. Neste estudo foram consideradas apenas as malhas de 270.188 e as de 571.837 nós.

3.3. Modelo cinético do coque

Sabe-se que os asfaltenos são os principais precursores na formação de coque e pela literatura [26], a cinética de formação de coque é considerada de primeira ordem, condição adotada neste estudo.

A literatura [5, 20] apresenta resultados de conversão de asfaltenos em coque e os parâmetros cinéticos. Para o problema considerado a temperatura encontra-se em torno de 400 °C e a conversão do precursor ao coque inferior a 5%.

3.4. Condições de contorno e iniciais

Neste trabalho os campos do fluido foram considerados convergidos e foram interpolados a partir dos resultados obtidos por SANTOS (2009).

Na entrada do coletor foram especificadas a vazão mássica e a temperatura do gasóleo residual bem como a concentração de asfaleno, não havendo coque na entrada. Além disso, considerou-se a intensidade de turbulência (I) de 10%. O fluxo mássico é uniforme sobre toda a superfície de entrada. Na tabela 1 estão apresentadas a densidade e viscosidade dinâmica do gasóleo.

Tabela 1 - Propriedades do Gasóleo utilizado como carga

Propriedades do Gasóleo	
Densidade	797,8447 kg m ⁻³
Viscosidade Dinâmica	0,6665 cP

Na saída do coletor foi imposta a condição de pressão estática média, permitindo que a pressão estática varie localmente, mas ficando restrita pelo valor médio especificado. A condição de fluxo zero para o coque na saída foi prescrita para que ele pudesse ser acumulado no domínio, enquanto que, para o asfaleno, a condição de fluxo zero foi estabelecida nas paredes.

Uma temperatura foi definida, representando a temperatura do vapor ascendente, para o fundo, calha e chaminés, sendo denominadas como paredes aquecidas. A lateral do prato coletor foi considerada adiabática, conforme pode ser visualizado na Figura 4. A condição de não-deslizamento foi aplicada para todas as paredes.

Na Tabela 2 estão descritas as condições de contorno adotadas:

Tabela 2 - Condições de contorno do problema

Entrada	
m_{GOR}	7,1453 Kg s ⁻¹
I	10%
T_{GOR}	370 °C
C_{coque}	0 Kg m ⁻³
$C_{asfalteno}$	30 Kg m ⁻³
Saída	
P_{est}	0 Pa
Fluxo de Coque	0 Kg m ⁻² s ⁻¹
Parede Aquecida	
não-deslizamento	
T_{Fundo}	400,7 °C
Fluxo de Asfalteno	0 Kg m ⁻² s ⁻¹
Parede Adiabática	
não-deslizamento	
Fluxo de Asfalteno	0 Kg m ⁻² s ⁻¹

onde, P_{EST} é a pressão estática, I é o intensidade de turbulência, T_{GOR} é a temperatura de alimentação do gásóleo, C_{coque} e $C_{Asfalteno}$ são as concentrações de coque e asfalteno, respectivamente, T_{Fundo} é a temperatura de fundo do prato coletor e m_{GOR} é a vazão mássica de gásóleo na alimentação.

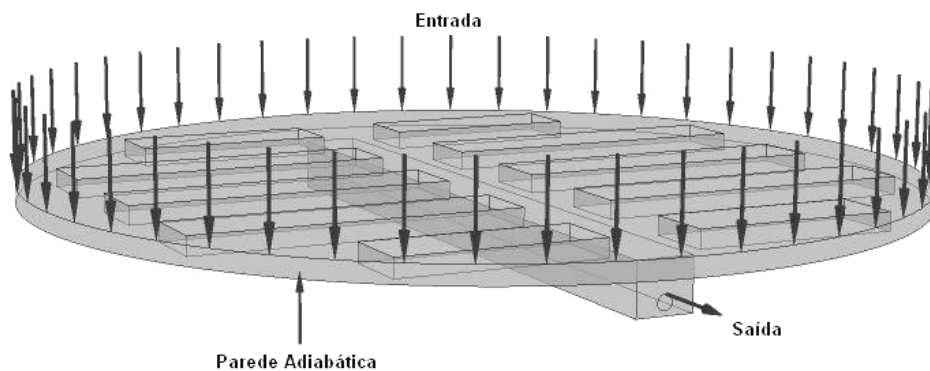


Figura 4 - Representação das condições de contorno do problema

3.5. Estratégia de solução

Para as simulações foram utilizadas as configurações para a partícula exibidas na Tabela 3:

Tabela 3 - Configurações da partícula de coque

Configurações	
Coeficiente de Restituição	0,36
Diâmetro	50 μm
Densidade	1500 Kg m^{-3}
Capacidade Calorífica	870 $\text{J Kg}^{-1} \text{K}^{-1}$

Para alcançar os objetivos propostos neste trabalho, foi preciso trabalhar com a injeção de partículas no volume de controle estudado (no caso o prato coletor de uma coluna de destilação). A idéia para que a simulação fosse uma boa representação da realidade foi injetar partículas por todo o volume de controle de modo proporcional à taxa de formação de coque sendo injetada uma partícula por nó da malha. A tentativa de

injetar uma partícula em cada nó não pode ser feita pelo fato do CFX limitar a definição do número de pontos de injeção de partículas. Como a malha mais grosseira estudada tem em torno de 270.000 nós, era inviável a representação do problema dada esta limitação. Para resolver esse impasse foram desenvolvidas duas rotinas em FORTRAN. A primeira responsável por obter o endereçamento na memória das variáveis necessárias para os cálculos e a outra responsável por definir as características das partículas. As rotinas foram incorporadas à definição do problema no CFX como uma *junction Box* e a outra diretamente na definição da injeção das partículas.

Para efetuar os cálculos, foram extraídas as seguintes propriedades de cada um dos nós da malha:

- Posição (x, y, z).
- Velocidade do fluido.
- Densidade.
- Temperatura.
- Distribuição normalizada de coque ($\text{coque}/\text{coque}_{\text{max}}$).
- Densidade volumétrica de formação de coque no volume do prato coletor.

Com estes dados, foram definidas as propriedades utilizadas para caracterizar cada partícula injetada. As propriedades definidas para cada partícula estão listadas a seguir:

- A posição na qual a partícula é injetada
- O Diâmetro da partícula

- A velocidade da partícula
- A temperatura da partícula
- A taxa mássica de geração ao qual a partícula é proporcional

A temperatura e velocidade das partículas são admitidas como iguais às do fluido no ponto de injeção, considerando que a partícula na verdade foi formada naquele ponto. O valor de diâmetro da partícula foi inserido diretamente na sub-rotina desenvolvida em FORTRAN.

A taxa mássica de geração foi calculada através da extração do valor da densidade volumétrica de coque (DV_{Coque}) formado do resultado da simulação obtido por SANTOS [5]. Embora seja uma variável volumétrica, o *software* CFX armazena essa variável na memória como uma variável mássica, ou seja, massa de coque formado por massa total do sistema. Na equação 3.1 DV_{Coque} tem unidade de Kg de coque por Kg do sistema. Este valor foi multiplicado pela densidade em cada nó e multiplicado posteriormente pelo volume do sub-volume corrente. O resultado destas operações foi finalmente dividido pelo tempo total de simulação transiente (t_s) de 1000 s definido por SANTOS [5], calculando-se assim o valor da taxa mássica de geração (Tm), a qual a partícula injetada é proporcional.

$$Tm = \frac{DV_{Coque} * \rho * V}{t_s} \quad (3.1)$$

onde, ρ é a densidade do sistema no sub-volume, V é o volume do sub-volume. Uma vez com todas as propriedades necessárias definidas, as partículas são injetadas.

3.6. Descrição da evolução de um fluido

No trabalho anterior [5], foi desenvolvido um estudo para mapear as taxas de formação de coque, foram obtidos também os perfis de escoamento do fluido bem como o

de temperatura. Neste mesmo estudo foi verificado que a fluidodinâmica do problema em questão é quase estacionária.

Feita esta observação quanto à fluidodinâmica do problema, considerou-se o campo de escoamento do fluido pseudo-estacionário. Assim, o campo de velocidade ao final de uma simulação foi interpolado para as malhas utilizadas neste trabalho. A temperatura, velocidade do fluido e a posição associada a cada nó da malha serviram como ponto de partida para o acompanhamento das partículas de coque.

Além do perfil de escoamento do fluido ser considerado como pseudo-estacionário, foi adotado o acoplamento via única, onde os perfis de escoamento do fluido não foram alterados pelas partículas de coque. Esta consideração torna-se válida, pois a fração volumétrica de partículas de coque é inferior a 1% não desempenhando papel significativo na alteração dos perfis de escoamento do fluido.

Ao serem injetadas no sistema com temperatura e velocidade equivalentes às do fluido as partículas passam a se movimentar livremente sob a ação da gravidade, do empuxo e do arrasto, este calculado de acordo com o campo fixo de velocidade do fluido.

Em sistemas multifásicos, onde uma das fases encontra-se dispersa em outra, a utilização da abordagem Lagrangeana para representar o sistema disperso nos dá a oportunidade de acompanhar a trajetória de cada uma das partículas e, por conseguinte seus pontos de deposição dentro do volume de controle.

Capítulo 4

Resultados e Discussão

Este capítulo destina-se à apresentação dos resultados obtidos no trabalho, visando comparar o perfil de formação de coque [5] com o perfil de deposição, a convergência de malha e entre as duas malhas consideradas bem como analisar a sensibilidade quanto a variações no diâmetro das partículas e no coeficiente de restituição partícula-parede. Foi utilizado um *Cluster* com 128 cores, 256 Gb de RAM, *Opteron quadricore* e rede *infiniband* para realização das simulações. Como critério de convergência de simulação foi definido um resíduo máximo de 0,0005 com passo de tempo de 0,00001 s para a integração das trajetórias das partículas considerando que o escoamento do fluido é quase-estacionário [5].

4.1. Teste de Sensibilidade da Malha

Para o teste de sensibilidade da malha foram utilizadas duas malhas, sendo que o número de nós da malha mais refinada é de aproximadamente o dobro da malha menos refinada. As malhas são não-estruturadas híbridas com 15 camadas de prismas nas regiões próximas às paredes [5]. O número de nós de cada malha é exibido na Tabela 3.

Tabela 4 - Número de nós das malhas 1 e 2.

Malha	Número de Nós
1	270.188
2	571.837

O teste de sensibilidade de malha é importante para garantir que haja convergência do resultado com relação ao tempo de residência das partículas e a distância limite percorrida pelas mesmas. Ao atingir a convergência em malha é possível fazer avaliações coerentes sobre o comportamento das partículas, assim como o perfil de deposição delas e sua taxa de acúmulo.

Para se chegar a condição de convergência, foram feitas diversas simulações com aumento gradativo na variável tempo de residência das partículas até que fosse obtido um perfil de convergência. Este perfil foi atingido em 700.000 s. A simulação com tempo de 1.000.000 s foi feita para assegurar que a convergência realmente foi atingida neste ponto.

4.1.1. Comparação dos resultados das simulações em diferentes intervalos de tempo e distância.

A avaliação da sensibilidade à malha foi conduzida comparando-se os resultados das simulações das duas malhas variando os critérios de rastreamento de partícula, tais como tempo e distância, até que fosse atingida a convergência da vazão mássica de partículas de coque bem como da variável fração volumétrica. A vazão mássica de coque foi utilizada para acompanharmos o acúmulo de coque no interior do domínio, enquanto que a fração volumétrica foi utilizada para sabermos a quantidade de coque presente em cada sub-volume da solução estacionária.

Para isso, foram comparados os balanços mássicos das partículas, assim como foram traçadas linhas em algumas regiões do coletor onde há uma maior concentração de partículas de coque depositadas, conforme pode ser visto na Figura 5, feita com o resultado da simulação da malha 2. Estas linhas não puderam ser traçadas em regiões próximas às paredes dada uma limitação do CFX de considerar mais de uma partícula em um mesmo sub-volume do domínio o que apresentou valores de fração volumétrica maior que 1, o que não é correto.

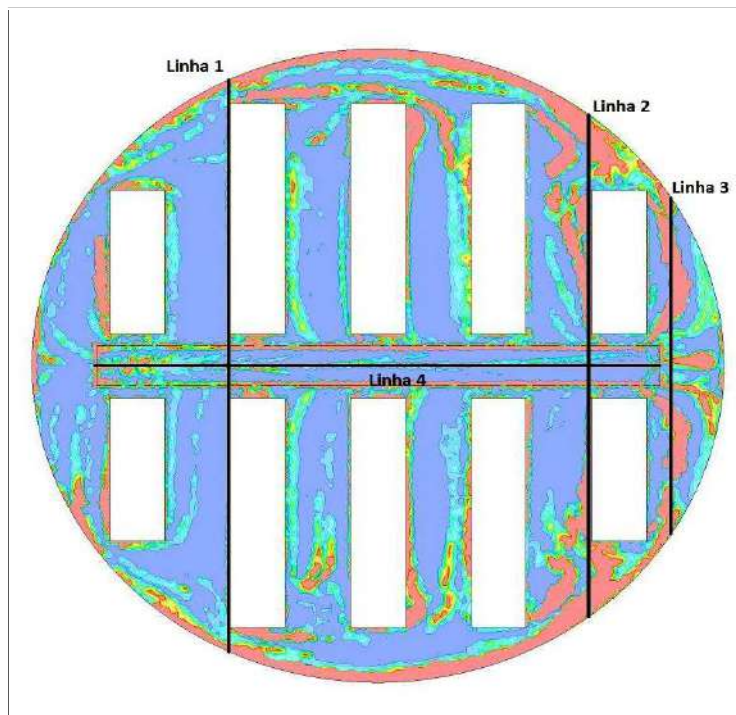


Figura 5 - Representação das linhas utilizadas para comparação entre malhas.

Foram obtidos gráficos da fração volumétrica das partículas de coque ao longo das linhas traçadas em dois diferentes intervalos de tempo. As Figuras 6, 7, 8 e 9 mostram a comparação para a malha 2 considerando intervalos de tempo equivalentes a 700.000 e 1.000.000 de segundos.

Com relação a distância limite de acompanhamento das partículas foi utilizado um valor de 130 metros.

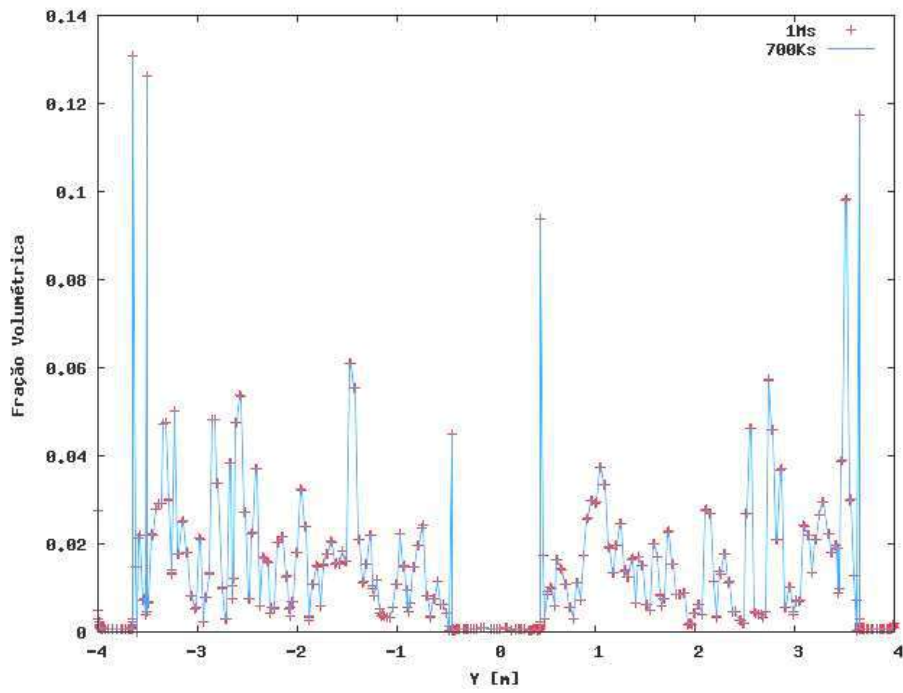


Figura 6 – Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 1 para malha 2

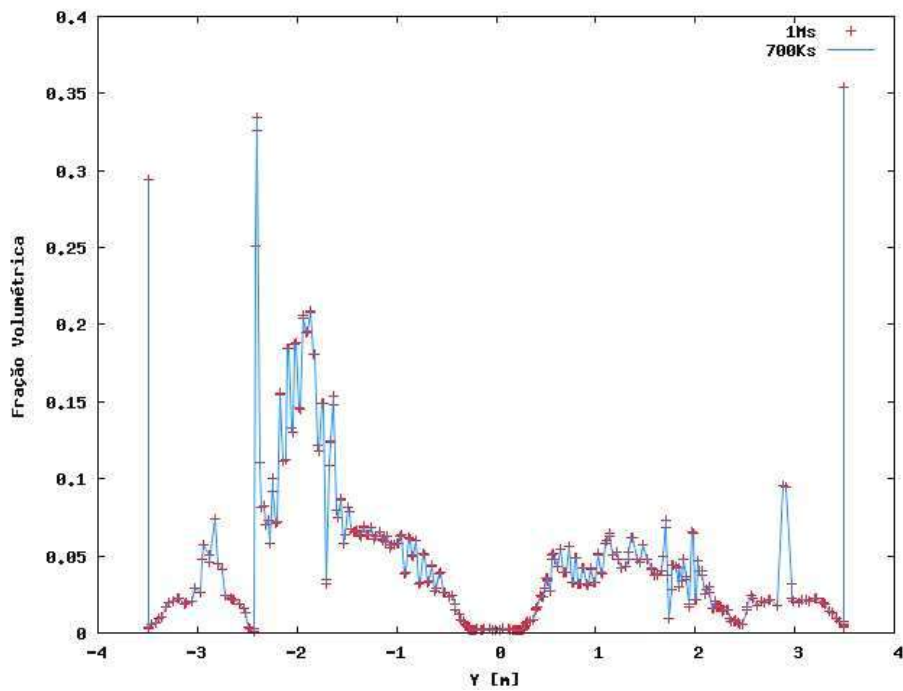


Figura 7 – Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 2 para malha 2

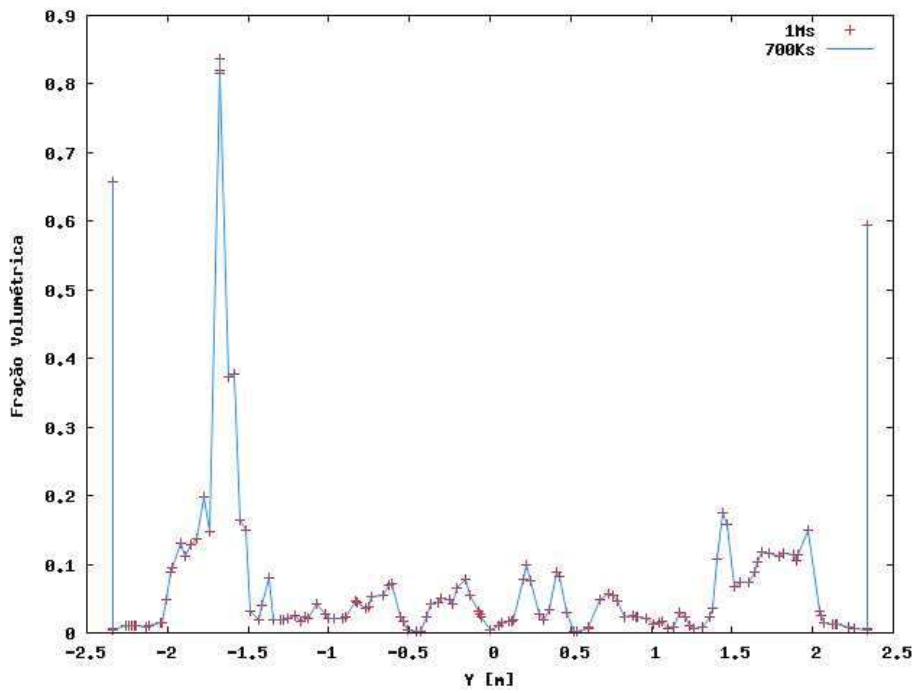


Figura 8 – Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 3 para malha 2

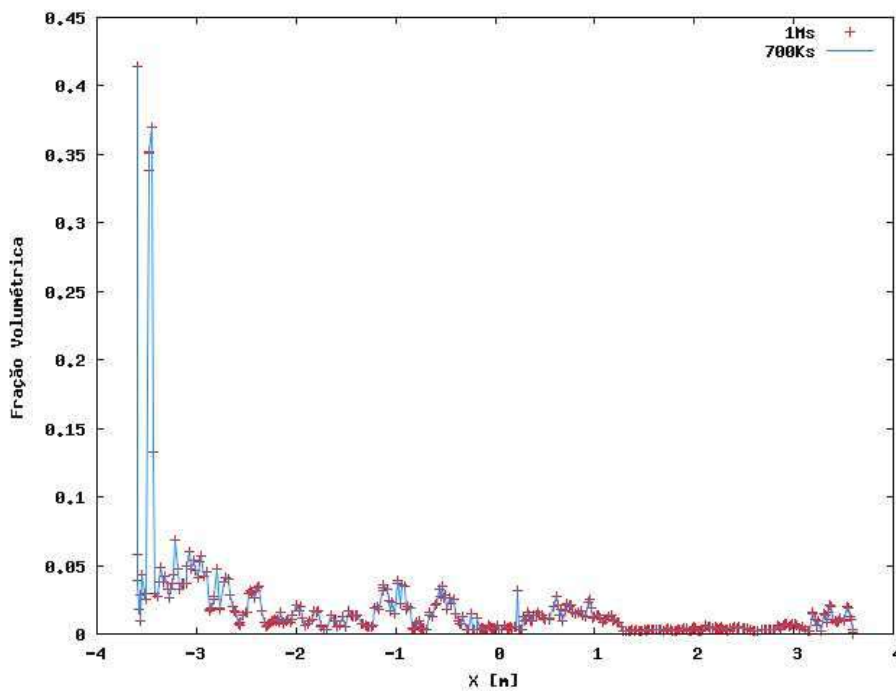


Figura 9 – Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 4 para malha 2

É possível notar pelos gráficos que os resultados obtidos para fração volumétrica de partículas de coque apresentam praticamente o mesmo perfil e que não mudam com o intervalo de tempo. O mesmo estudo foi conduzido para a malha 1, sendo alcançadas as mesmas conclusões obtidas para os testes conduzidos para a malha mais refinada.

O balanço mássico de partículas de coque permitiu comparar a quantidade de partículas que deixaram o volume de controle bem como a quantidade de coque acumulado no domínio em diferentes intervalos de tempo. Os resultados são demonstrados nas Tabelas 4 e 5, onde a diferença percentual da taxa mássica de partículas de coque acumuladas no domínio nos dois intervalos de tempo foi similar.

Tabela 5 - Balanço de massa para diferentes tempos de rastreamento para malha 1

Tempo de Rastreamento (s)	Taxa mássica de partículas de coque (kg s^{-1})			
	Injeção	Saída	Acúmulo	Acúmulo %
700.000	0,05136	0,05095	0,00041	0,80
1.000.000	0,05136	0,05095	0,00041	0,80

Tabela 6 – Balanço de massa para diferentes tempos de rastreamento para malha 2

Tempo de Rastreamento (s)	Taxa mássica de partículas de coque (kg s^{-1})			
	Injeção	Saída	Acúmulo	Acúmulo %
700.000	0,05141	0,051130	0,000280	0,54
1.000.000	0,05141	0,051130	0,000280	0,54

4.1.2. Comparação dos resultados entre malhas de diferentes tamanhos.

Para o teste de sensibilidade ao grau de refinamento da malha analisamos os perfis da variável fração volumétrica de coque e taxa de acúmulo do coque no prato coletor de líquido residual. Utilizamos as mesmas linhas definidas anteriormente (linhas 1 a 4). As Figuras 10, 11, 12 e 13 apresentam a variável fração volumétrica em relação ao comprimento nas 4 linhas.

É possível observar nos gráficos que não houve convergência entre as malhas 1 e 2, dada a grande diferença entre os perfis da variável fração volumétrica. Neste trabalho foram feitas simulações para uma malha ainda mais refinada, em torno de 1.000.000 de nós. Porém os resultados obtidos não puderam ser visualizados, devido a uma limitação de hardware, mais especificamente uma limitação da memória RAM do computador utilizado.

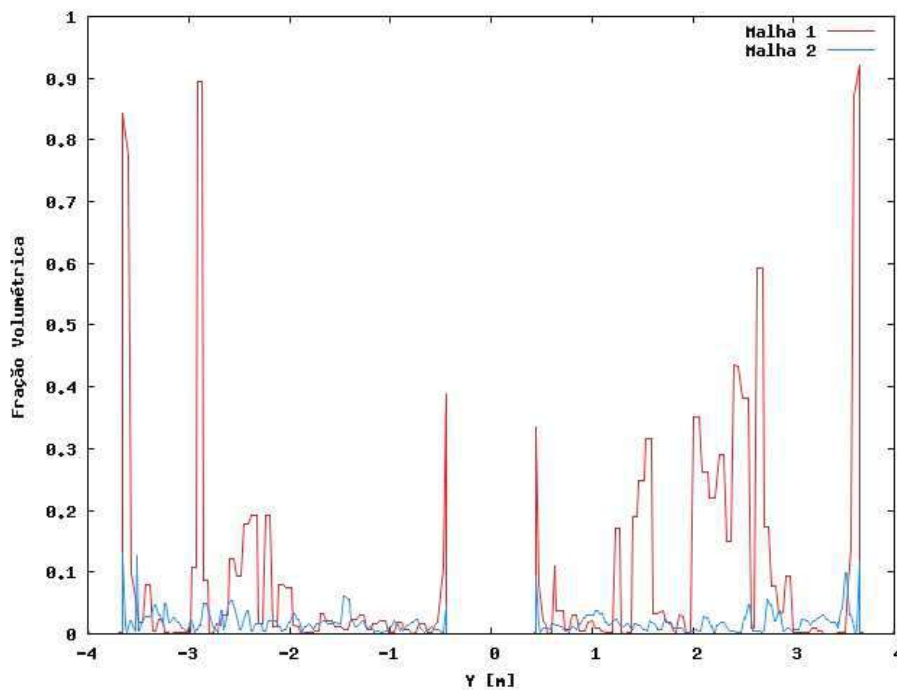


Figura 10 – Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 1 para as malhas 1 e 2

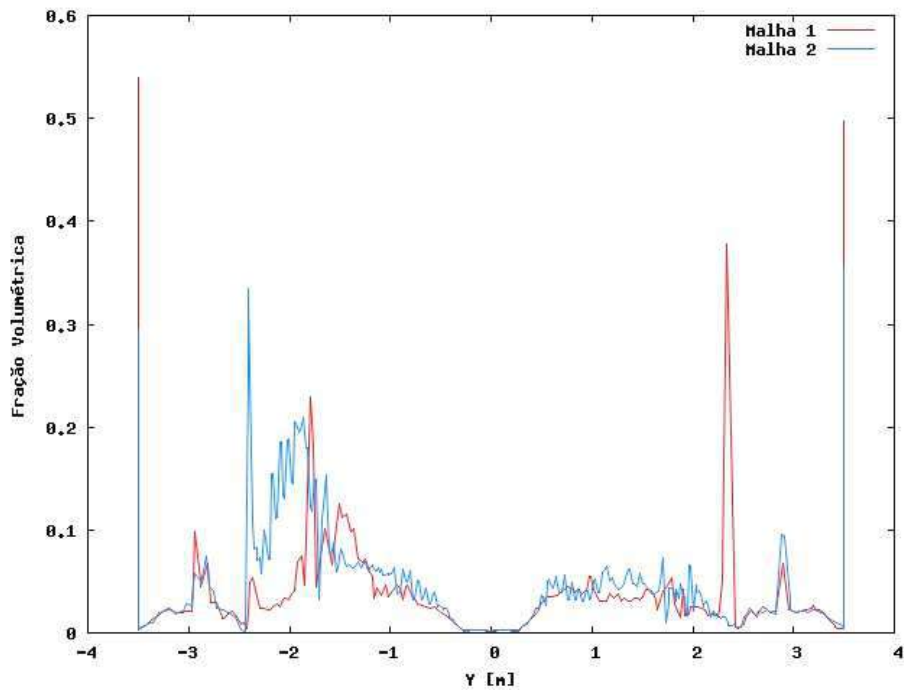


Figura 11 – Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 2 para as malhas 1 e 2

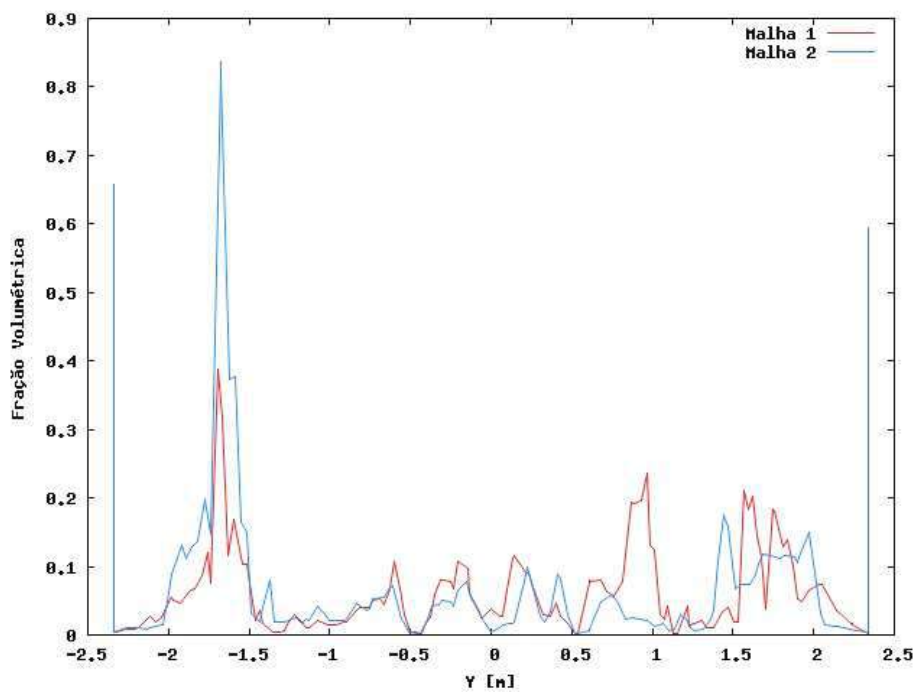


Figura 12 – Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 3 para as malhas 1 e 2

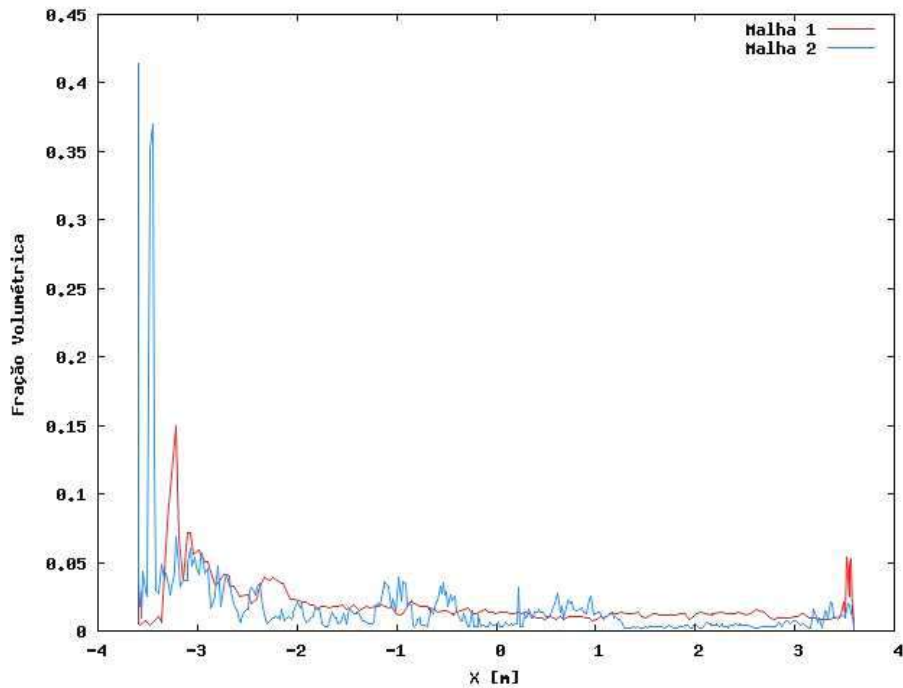


Figura 13 – Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 4 para as malhas 1 e 2

Assim como nos perfis da fração volumétrica a convergência para os valores da taxa de acúmulo de coque também não foi atingida. Na Tabela 6 é exposto o balanço de massa para as partículas de coque.

Tabela 7 - Balanço de massa para as partículas de coque comparando malhas 1 e 2

Malha	Diâmetro (μm)	Coef. De Restituição	Taxa mássica de partículas de coque (kg s^{-1})			
			Injeção	Saída	Acúmulo	Acúmulo %
1	50	0,36	0,05136	0,050952	0,000411	0,80
2			0,05141	0,051130	0,000280	0,54

Para que a convergência de malha fosse atingida seria necessária a confecção de malhas mais refinadas. Infelizmente, devido a limitações de *hardware*, não foi possível trabalhar com malhas mais refinadas neste trabalho.

4.2. Teste de sensibilidade à variação de parâmetros

Nesta fase do projeto após ser estabelecida a condição de convergência para o tempo de residência das partículas para a malha mais refinada (malha 2), foi feita a variação do diâmetro e coeficiente de restituição em torno dos valores utilizados na convergência. O objetivo é avaliar a dependência da fração volumétrica de coque nos sub-volumes do domínio e a taxa de acúmulo de coque no volume do coletor de líquido residual a estes parâmetros.

Com esta análise será possível prever quais parâmetros possuem maior influência sobre o perfil de deposição do coque. Os parâmetros analisados foram o diâmetro de partícula de coque e o coeficiente de restituição, como mostra a Tabela 7.

Tabela 8 - Definição das condições analisadas de sensibilidade para diâmetro e coeficiente de restituição para malha 2.

Condição	Diâmetro (µm)	Coef. De Restituição
1	50	0,36
2	50	0,10
3	50	0,80
4	10	0,36
5	10	0,10
6	10	0,80

4.2.1. Sensibilidade com relação ao diâmetro

Para análise de sensibilidade com relação ao diâmetro foi considerado diâmetro de 10 µm. Não foram considerados diâmetros acima de 50 µm dado que os núcleos de formação das partículas de coque têm diâmetros em torno de 0,3 µm [14]. As Figuras 14, 15, 16 e 17 exibem a fração volumétrica de coque, comparando os dois diâmetros.

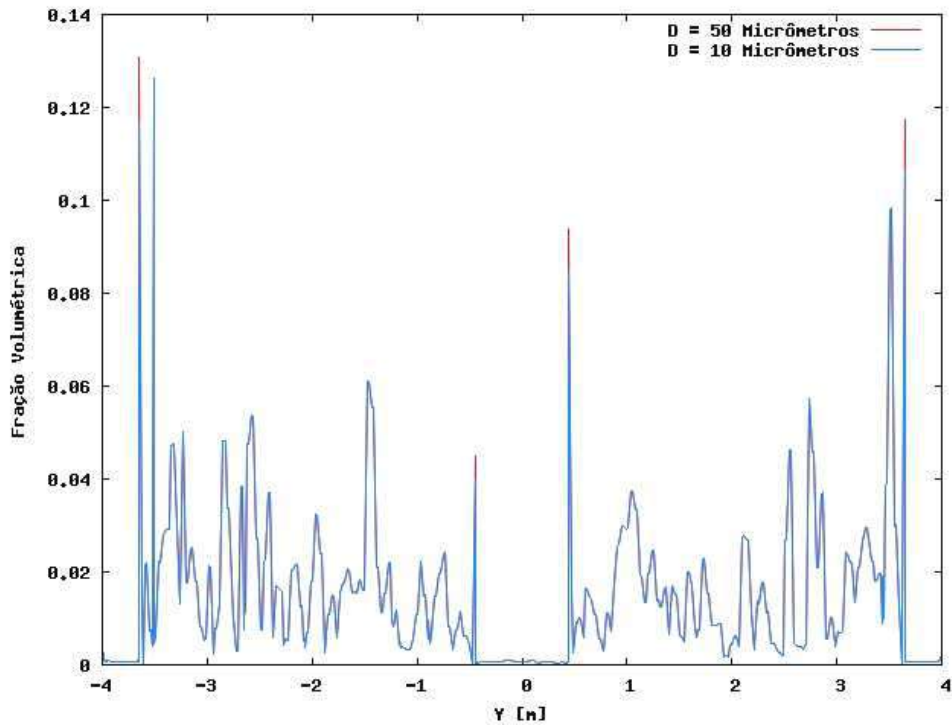


Figura 14 – Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 1 para análise de sensibilidade ao diâmetro para malha 2

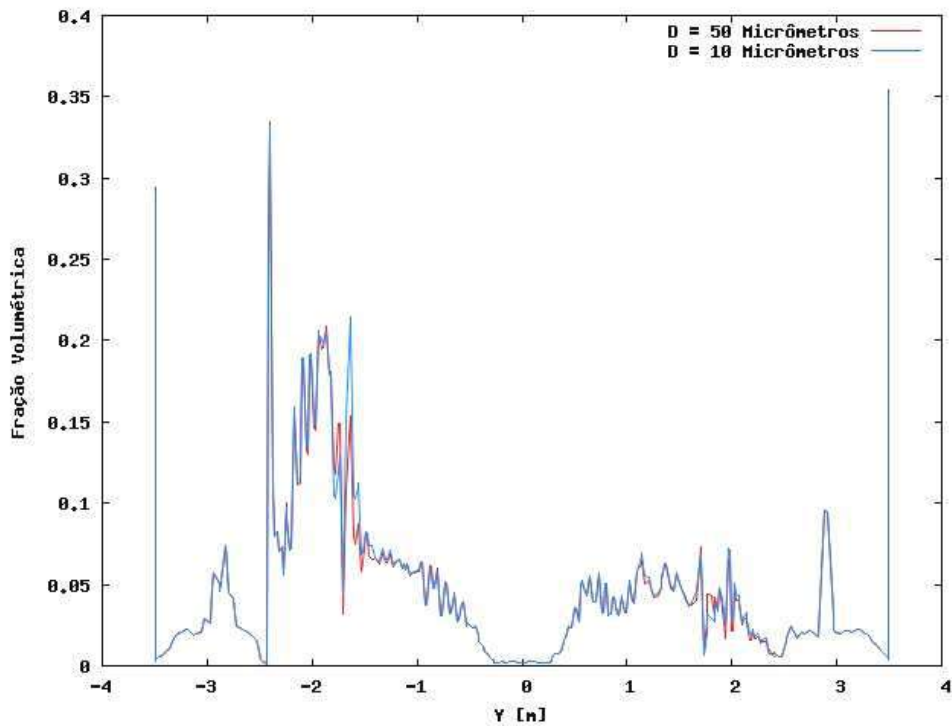


Figura 15 – Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 2 para análise de sensibilidade ao diâmetro para malha 2

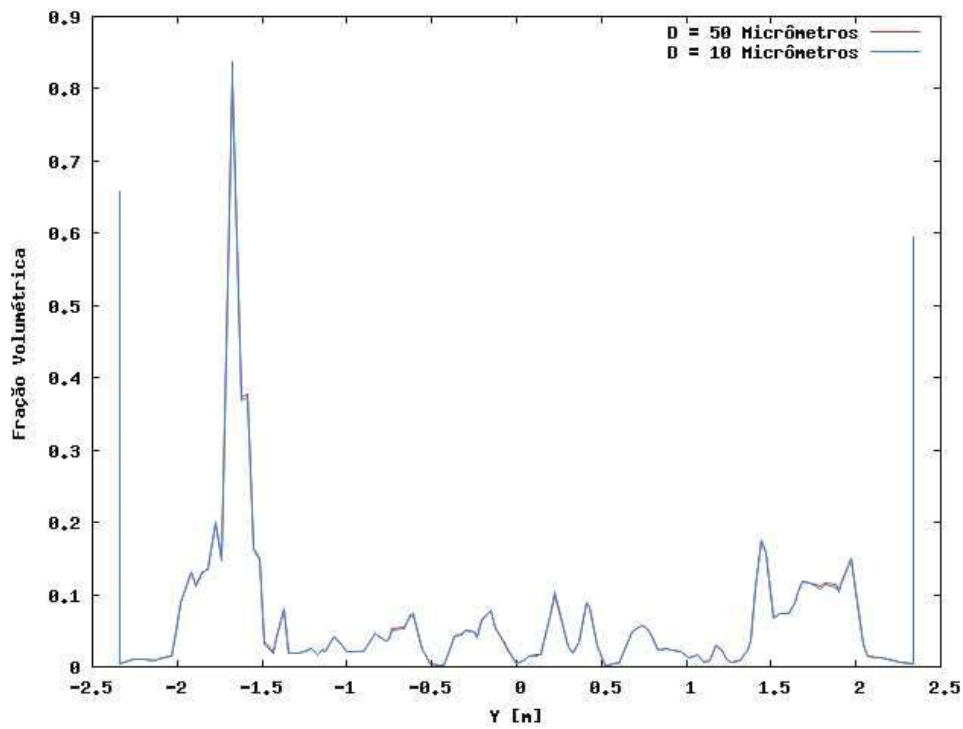


Figura 16 – Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 3 para análise de sensibilidade ao diâmetro para malha 2

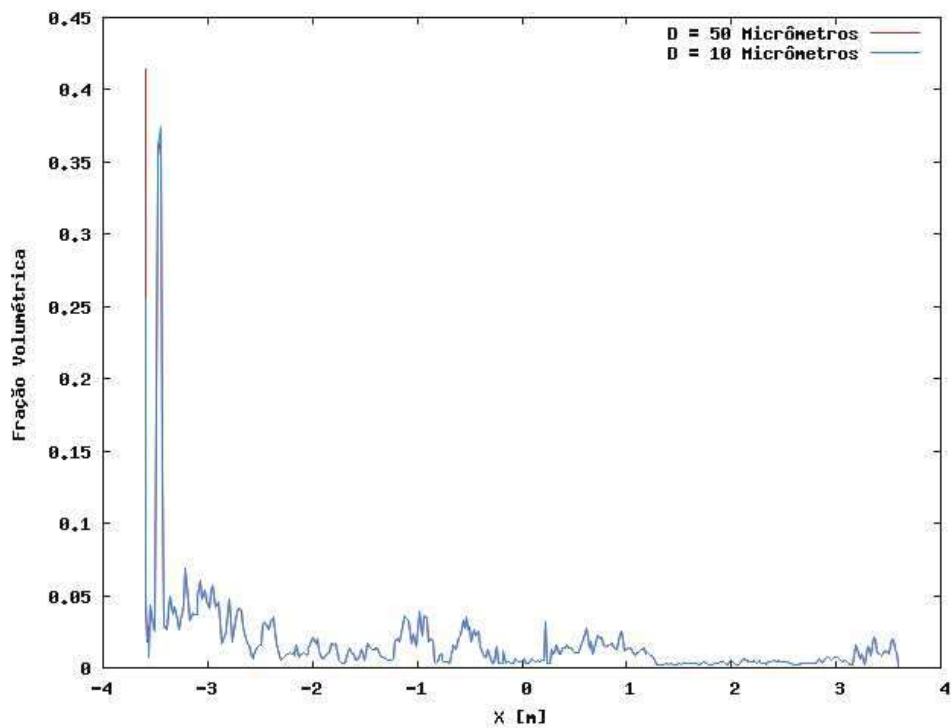


Figura 17 – Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 4 para análise de sensibilidade ao diâmetro para malha 2

A partir dos gráficos acima percebe-se que o perfil de concentração das partículas de coque no interior do prato coletor de líquido residual não sofre grandes influências devido à variação do diâmetro das partículas injetadas, o que indica uma pequena sensibilidade da deposição de coque com relação a este parâmetro.

4.2.2. Sensibilidade com relação ao coeficiente de restituição

Para este trabalho o coeficiente de restituição utilizado nas análises foi de 0,36. Este valor foi obtido na literatura [19] onde o autor estudava as colisões entre partículas de carvão em paredes de aço. Por se tratar de dois compostos de natureza carbonácea, foi assumido este valor também para as partículas de coque.

O coeficiente de restituição é uma variável muito importante neste estudo, pois a elasticidade das colisões partícula-parede influencia diretamente em como e onde as partículas irão depositar. Por isso, foram utilizadas variações positiva e negativa em torno do valor de 0,36. Os gráficos 18, 19, 20 e 21 mostram o comportamento da variável fração volumétrica de coque sobre as linhas estudadas.

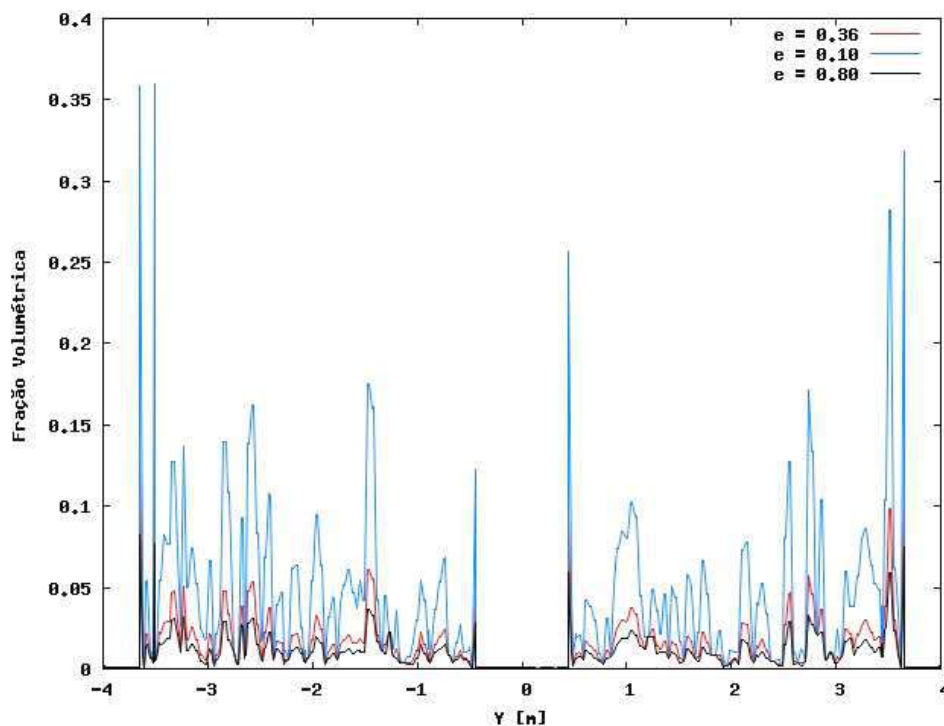


Figura 18 - Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 1 para análise de sensibilidade ao coeficiente de restituição para malha 2

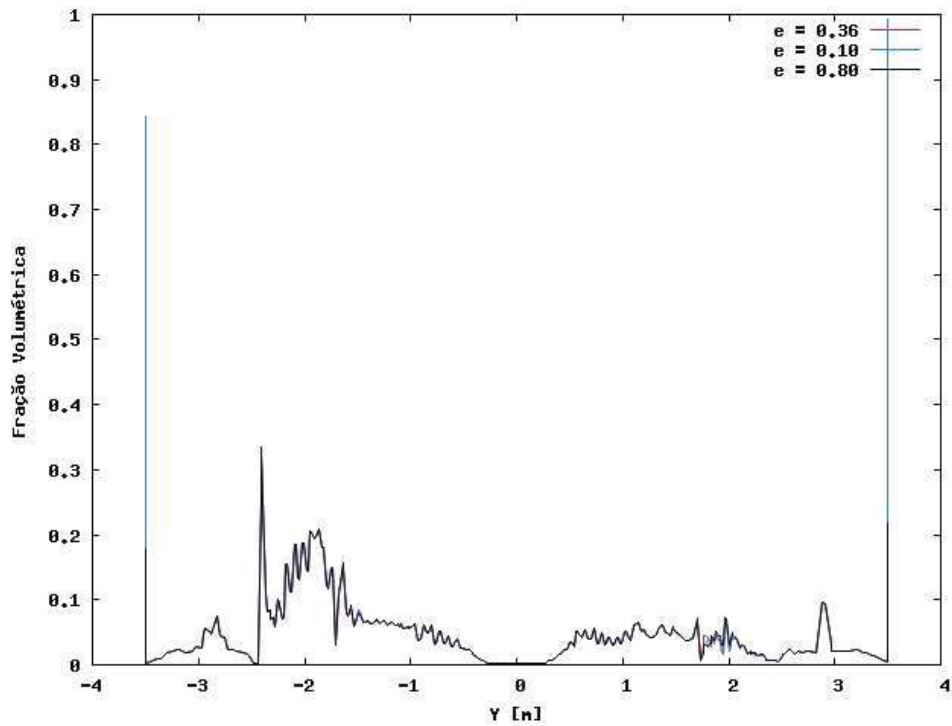


Figura 19 - Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 2 para análise e sensibilidade ao coeficiente de restituição para malha 2

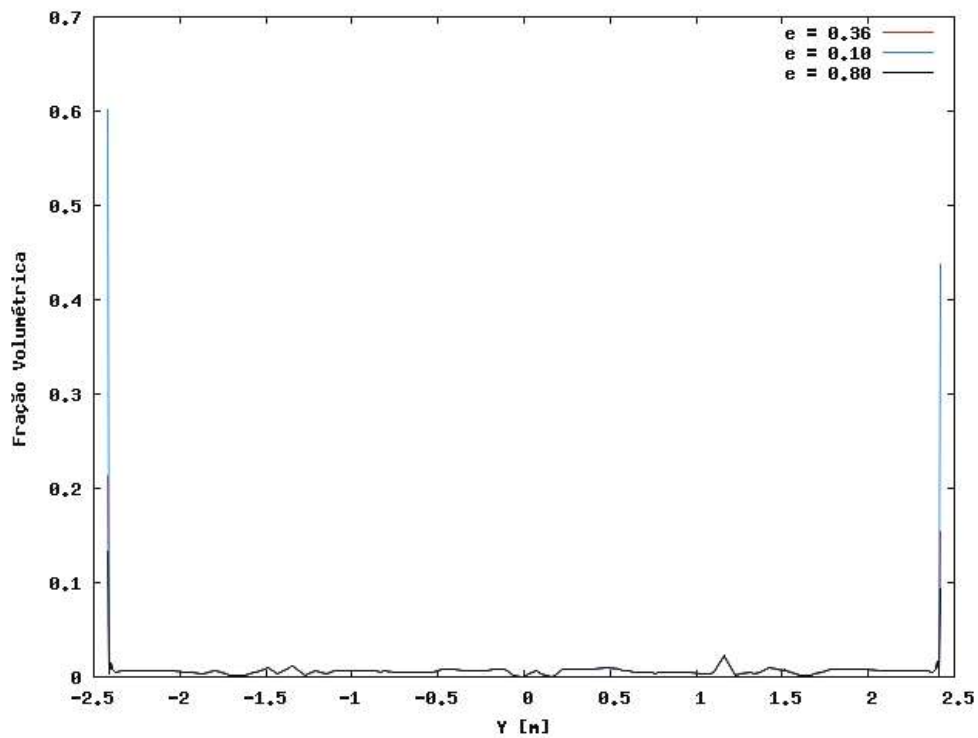


Figura 20 - Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 3 para análise de sensibilidade ao coeficiente de restituição para malha 2

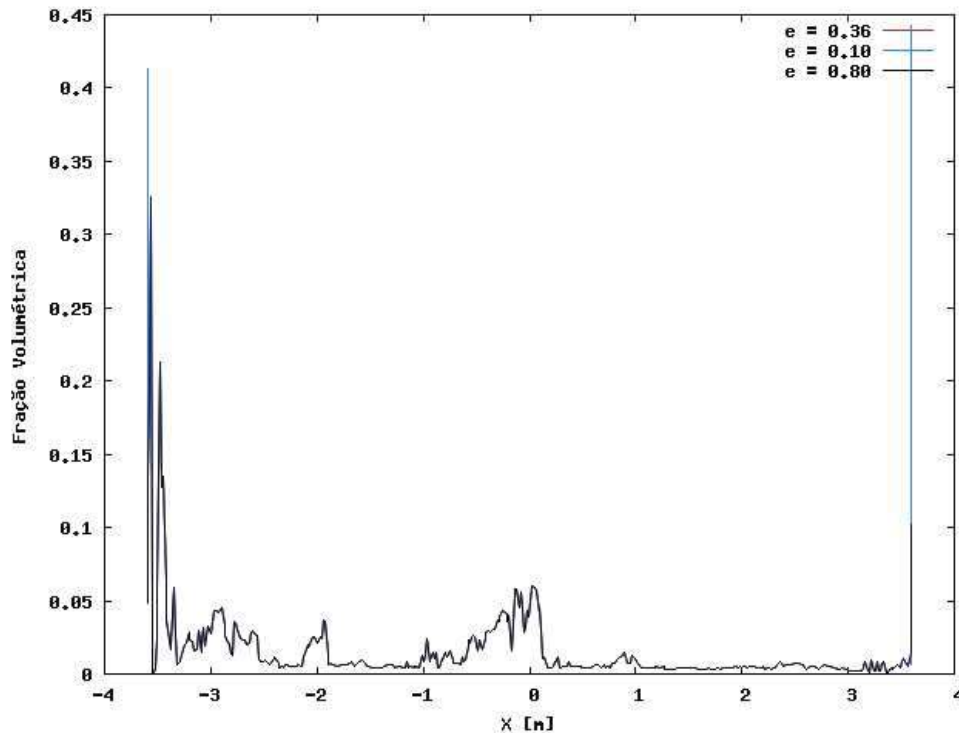


Figura 21 - Perfil da fração volumétrica de coque ao longo da linha 4 para análise e sensibilidade ao coeficiente de restituição para malha 2

Nos gráficos acima percebe-se que o coeficiente de restituição influencia significativamente em regiões próximas às paredes do coletor. Isto é representado nos gráficos como uma grande diferença na magnitude da variável fração volumétrica, onde estes valores aumentam com a diminuição do coeficiente de restituição. Este é um resultado esperado dado que quanto menor o coeficiente de restituição mais energia é perdida na colisão partícula-parede fazendo com que a deposição aumente.

O perfil de fração volumétrica da linha 1 exposto na Figura 18 é peculiar, dado que há diferenças significantes ao longo de toda a linha e não apenas nas paredes. Isto se deve provavelmente a diferenças no perfil de velocidades comparando com as outras linhas dado que a linha 1 está mais distante do bocal de saída, representando uma região menos turbulenta o que torna o coeficiente de restituição um parâmetro mais influente no perfil de deposição.

Na Tabela 8 é apresentado o balanço de massa para as diferentes condições simuladas.

Tabela 9 – Cálculo do balanço de massa para análise de sensibilidade com relação ao diâmetro e coeficiente de restituição da malha 2.

Condição	Diâmetro (µm)	Coef. De Restituição	Taxa mássica de partículas de coque (kg s ⁻¹)			
			Injeção	Saída	Acúmulo	Acúmulo %
1	50	0,36	0,05141	0,051130	0,000280	0,54
2	50	0,10	0,05141	0,051019	0,000391	0,76
3	50	0,80	0,05141	0,051123	0,000287	0,56
4	10	0,36	0,05141	0,050751	0,000353	0,69
5	10	0,10	0,05141	0,051056	0,000354	0,69
6	10	0,80	0,05141	0,051075	0,000335	0,65

Pode-se observar que os percentuais de acúmulo exibidos na Tabela 8 apresentam flutuações devido às diferenças de condição das simulações. Os valores ficaram compreendidos numa faixa que de valores entre 0,54% e 0,76%. Esperava-se que quanto maior o coeficiente de restituição menor seria o percentual de acúmulo de coque no sistema. Para os casos de diâmetro de partícula igual a 10 µm, esta premissa é atendida sendo observado que o acúmulo associado ao coeficiente de restituição de 0,80 foi o menor entre as 3 condições.

Para os casos de diâmetro iguais a 50 µm os resultados dos balanços de massa não corresponderam ao resultado esperado, pois foram observadas discrepâncias entre os valores de acúmulo para o maior valor e o valor intermediário de coeficiente de restituição. O esperado seria que quanto menor o coeficiente de restituição, maior fosse o acúmulo de coque no sistema já que coeficientes menores representam maiores perdas de energia cinética após o choque.

Além disto, percebeu-se também que com coeficiente de restituição igual a 0,10 e diâmetro de 50 µm o acúmulo mostrou-se superior aos demais. Eram esperados valores maiores que para os outros coeficientes, mas não com esta magnitude. Deve haver algum efeito associado para este caso que proporciona valores mais elevados, podendo ser considerado um ponto crítico ou até mesmo ao fato da ordem de grandeza dos resultados ser próxima a ordem de grandeza dos erros associados, uma vez que a quantidade de partículas acumuladas no domínio representa apenas 0,005% p/p do total. Além disso para qualquer afirmação mais precisa seria necessário obter primeiramente a convergência de malha.

4.3. Comparação formação x deposição de coque.

A última análise deste trabalho é a comparação dos resultados de formação obtidos por [5] em seu estudo com a distribuição do coque formado.

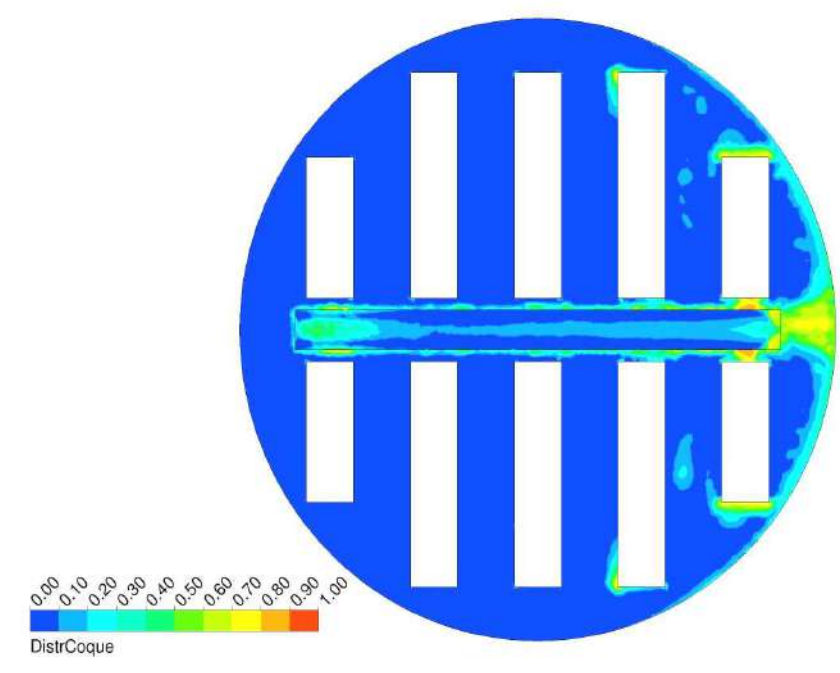


Figura 22 - Perfil de formação de coque obtido em [5]

É possível observar na Figura 22 que as regiões mais críticas de formação de coque estão na extremidade do coletor do lado do bocal de saída, entre as chaminés e a calha, nas faces das chaminés de frente à lateral do coletor, especialmente nas duas chaminés laterais do lado do bocal, na face do bocal e na região central e nas extremidades da calha.

Quanto à fluidodinâmica, há ocorrência de zonas de recirculação provocadas pelo choque do fluido com as chaminés, porém não há pontos de estagnação que aprisionem o fluido, ou seja, essas zonas não provocam a formação de coque [5].

O sentido do movimento em direção ao bocal de saída resulta em um aumento de velocidade, como é observado no perfil de velocidade mostrado na Figura 23. Com este aumento ocorre um crescimento também do coeficiente de transferência de calor da parede e conseqüentemente, uma variação do fluxo de calor da superfície para o fluido. A partir da simulação do coletor pode-se identificar que a principal causa de formação do coque é a ocorrência de pontos quentes [5].

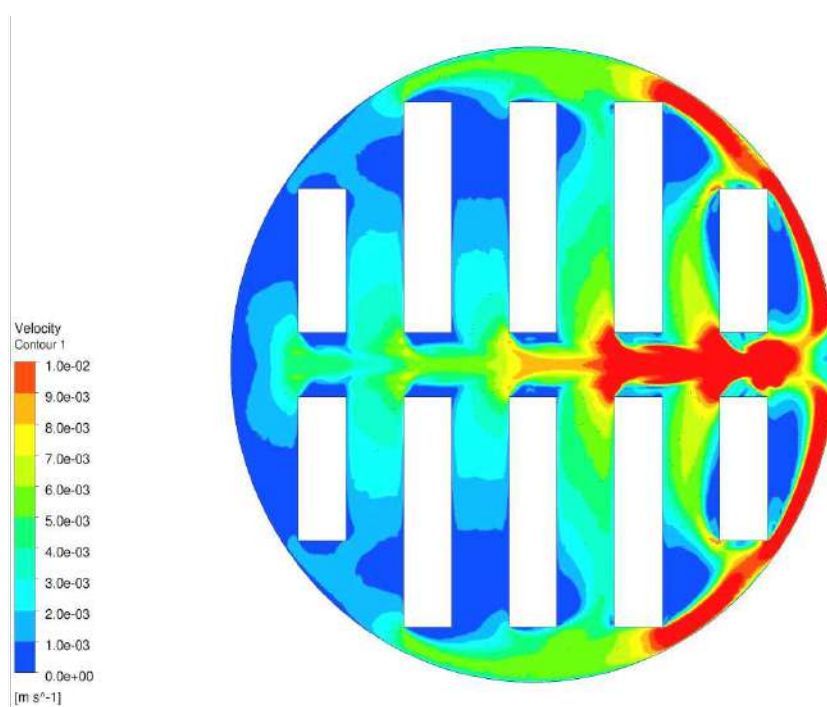


Figura 23 - Perfil de velocidade em um plano próximo ao fundo do prato coletor [5]

A Figura 24 mostra o perfil de deposição do coque no fundo do prato coletor. Nota-se que as regiões mais críticas de deposição estão próximas à parede do coletor, das chaminés e das quinas da calha.

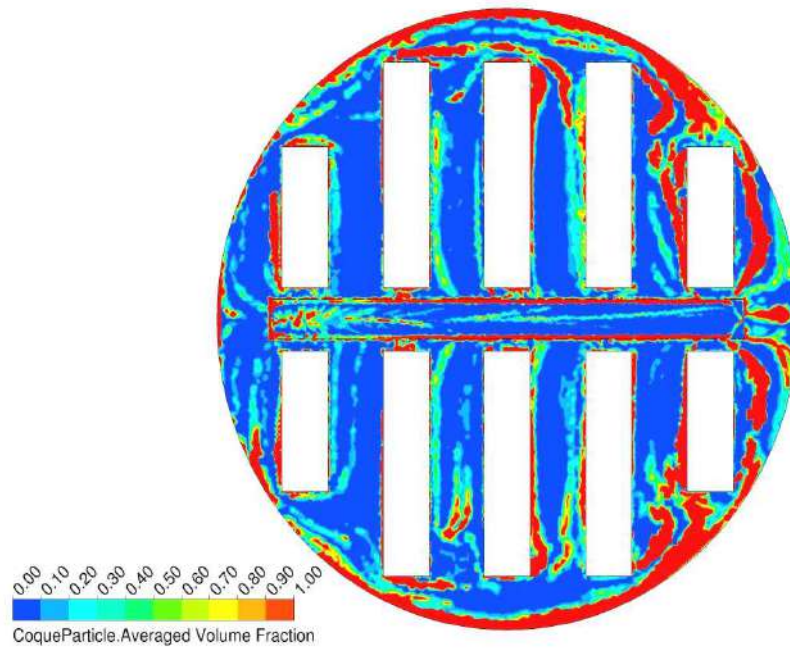


Figura 24 - Perfil de deposição de coque no fundo do prato coletor

Comparando-se os perfis de formação e de distribuição de coque percebe-se que as partículas se dispersam pelo volume do coletor, depositando-se em regiões que nem mesmo são críticas em formação. As partículas de coque formadas têm perfil de velocidade igual ao do fluido no ponto de origem e com isso passam a se movimentar ao longo do domínio, colidindo com as superfícies do prato coletor até que tenham perdido energia suficiente, fazendo com que depositem em algum ponto do domínio. Este ponto de deposição não é necessariamente próximo ao local de formação da partícula.

Capítulo 5

Conclusão

O objetivo deste trabalho foi determinar o perfil de deposição do coque formado em um coletor de líquido de gasóleo residual através do uso da técnica de CFD através do *software* ANSYS CFX-12.0. Este trabalho foi baseado em um estudo prévio onde foi assumido um modelo cinético simples de formação de coque.

Na formulação do problema, consideramos um perfil de velocidade pseudo-estacionário, utilizando como ponto de partida para a simulação o perfil de velocidade encontrado em [5], consideramos também o desacoplamento fluido-partícula por termos frações de coque inferior a 1% v/v.

Para injeção das partículas foi desenvolvida uma rotina em FORTRAN dada à limitação do *software* na definição do número de pontos de injeção de partículas. De modo a representar melhor o problema foi injetada uma partícula por nó da malha.

Na análise de sensibilidade da malha, foram utilizados dois refinamentos, um com aproximadamente 270.000 nós e outro com aproximadamente o dobro deste valor. Notamos que a convergência não foi atingida, sendo necessário haver um refinamento da malha para tal. Considerando que os perfis de velocidades utilizados como ponto de partida também não obtiveram convergência entre malhas [5].

Quanto à sensibilidade com relação aos parâmetros, nota-se uma influência considerável, principalmente nas regiões próximas às paredes do coletor, quando analisados os valores de fração volumétrica média para o coque. Para o fluxo mássico, foram obtidos valores na faixa de 0,54% a 0,76% de acúmulo. Foi verificado que podem ocorrer erros dado que a ordem de grandeza dos resultados é próxima a ordem de grandeza das incertezas.

Analisando o perfil de deposição de coque com relação ao perfil de formação, observamos o espalhamento das partículas formadas por todo o volume. Onde os principais pontos de deposição foram nas regiões de junções entre o fundo e lateral do coletor, paredes das chaminés e quinas da calha.

Neste trabalho a técnica de CFD se mostrou útil para análise preliminar da deposição de coque em coletores de gásóleo líquido residual. Para os próximos estudos, pode-se buscar primeiramente a convergência entre malhas, o que depende fortemente das configurações de hardware (memória RAM, espaço de disco e etc).

Podem-se também ser explorados uma série de considerações que façam com que o problema descreva melhor a realidade. São elas:

- Utilização de um modelo estocástico de distribuição de diâmetro de partículas.
- Consideração de aglomeração das partículas de coque
- Estudo mais aprofundado das relações de choque partícula-partícula e partícula-parede.
- Implementação de modelos mais complexos de injeção de partículas.
- Proposição de geometrias alteradas a fim de estudar melhorias na conformação do prato coletor.

Referências Bibliográficas

- [1] MAPLES, R.E., *Petroleum Refinery Process Economics*. 2 ed. Oklahoma, PennWell, 2000.
- [2] SPEIGHT, J.G., "Petroleum asphaltenes Part 2: the Effect of asfalthenes and Resin constituents on recovery and refining processes", *Oil & Gas Science and Technology*, v. 59, n. 5, pp. 479-488, 2004.
- [3] RAHMANI, S., McCAFFREY, W.C., DETTMAN, H.D., GRAY, M.R., "Coking kinetics of asphaltenes as a function of chemical structure", *Energy & Fuels*, v. 17, n. 4, pp. 1048-1056, 2003
- [4] GONÇALVES, M.L.A., RIBEIRO, D.A., TEIXEIRA, A.M.R.F., TEIXEIRA, M.A.G., "Influence of asphaltenes on coke formation during the thermal cracking of different Brazilian distillation residues", *Fuel*, v. 86, pp. 619-623, 2007.
- [5] SANTOS, A.B., *Estudo do comportamento térmico do coletor de líquido de gasóleo residual visando à análise de formação de coque pela técnica de CFD*. Dissertação de Mestrado. COPPE / UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2009.
- [6] WANG, J., ANTHONY, E.J., "A study of thermal-cracking behavior of asphaltenes", *Chemical Engineering Science*, v. 58, pp. 157-162, 2003.
- [7] KISTER, H.Z., "What caused tower malfunctions in the last 50 years?", *Trans IchemE*, v. 81, pp. 5-26, 2003.

- [8] PACHECO, M.E., *Desenvolvimento de metodologia para desativação acelerada de catalisadores de hidrotratamento em planta piloto*. Tese de Doutorado., COPPE / UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- [9] SCHABRON, J.F., PAULI, A.T., ROVANI, J.F., MIKNIS, F.P., MIKNIS Jr., F.P., "Predicting coke formation tendencies", *Fuel*, v. 80, pp. 1435–1446, 2001.
- [10] TILLMAN, D.A., HARDING, N.S., *Fuels of Opportunity: Characteristics and Uses In Combustion Systems*. Elsevier, 2004.
- [11] ERRERA, M.R., MILANEZ, L.F., "Thermodynamic analysis of a coke dry quenching unit", *Energy Conversion & Management*, v. 41, pp. 109-127, 2000.
- [12] SILVA, A.C., MCGREAVY, C., SUGAYA, M.F., "Coke bed structure in a delayed coker", *Carbon*, v. 38, pp. 2061-2068, 2000.
- [13] FENG-QIN, L., YE-XIANG, L., MANNWEILER, U., PERRUCHOU, R., "Effect of coke properties and its blending recipe on performances of carbon anode for aluminium electrolysis", *J. Cent. South Univ. Technol.*, v. 13, pp. 647-652, 2006.
- [14] DYACHOK, N.G., DYACHOK, A.N., ZAKHARTSOV, G.S., SHARIGA, A.D., SHENTSOV, A.I., "Properties of petroleum coke in sintering", *Steel in Translation*, v. 39, pp. 763-766, 2009.
- [15] BI, W., McCAFFREY, W.C., GRAY, M.R., "Agglomeration and deposition of coke during cracking of petroleum vacuum residue", *Energy & Fuels*, v. 21, pp. 1205-1211, 2007.
- [16] DU, W., BAO, X., XU, J., WEI, W., "Computational fluid dynamics (CFD) modeling of spouted bed: Influence of frictional stress, maximum packing limit and coefficient of restitution of particles", *Chemical Engineering Science*, v.61, pp. 4558-4570, 2006.
- [17] BASILE, A.G., DUMONT, R.S., "Coefficient of restitution for one-dimensional harmonic solids", *Physical Review E*, v. 61, pp. 2015-2023, 2000.
- [18] PAIN, C.C., MANSOORZADEH, S., de OLIVEIRA, C.R.E., "A study of bubbling and slugging fluidised beds using the two-fluid granular temperature model", *International Journal of Multiphase Flow*, v. 27, pp. 527-551, 2001.

- [19] SCHADE, K.-P., ERDMANN, H.-J., HÄDRICH, T., SCHNEIDER, H., FRANK, T., BERNERT, K., "Experimental and numerical investigation of particle erosion caused by pulverised fuel in channels and pipework of coal-fired power plant", *Powder Technology*, v. 125, pp. 242-250, 2002.
- [20] GONÇALVES, M.L.A., *Estudo de comportamento térmico de asfaltenos de um petróleo brasileiro*. Tese de Doutorado. Departamento de Química Fundamental / USP, São Paulo, SP, Brasil.
- [21] KAES, G.L., *Refinery Process Modeling*. 1 ed, Georgia, Athens Printing, 2000.
- [22] CHAPMAN, S.J., *FORTRAN 90/95 for Scientists and Engineers*. 1 ed, Boston, WCB McGraw Hill, 1998.
- [23] FELICI, H.M., *A coupled Eulerian/Lagrangian method for the solution of three-dimensional vortical flows*. Tese de Doutorado. Department of Aeronautics and Astronautics / MIT, Cambridge, MA, Estados Unidos da América.
- [24] WEHRLI, M., SCHAEFFER, P. K. H., "Investigation of the liquid deposition of various steam distribution systems in separation columns", 2008.
- [25] PALADINO, E.E., RIBEIRO, D., REIS, M.V., GERALDELLI, W.O., "A CFD model for the washing zone in coker fractionators", *A.I.Ch.E. Annual Meeting*, 2005.
- [26] WIEHE, I. A., "A phase-separation kinetic model for coke formation", *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 32, pp. 2447–2454, 1993.
- [27] "ANSYS CFX-Tutorial", ANSYS, Inc., 2006.