

CAMBIO DE LOS COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA EN REACTORES DE DESINTEGRACION CATALITICA

TRANSFER COEFFICIENTS VARIATION IN CATALYTIC CRACKING REACTORS

E. F. Villafuerte Macías^{1,2}, R. Aguilar López¹ y R. Maya Yescas^{3*}

¹Departamento de Energía. Universidad Autónoma Metropolitana – Azcapotzalco.

²Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas. Instituto Politécnico Nacional.

³Programa de Tratamiento de Crudo Maya. Instituto Mexicano del Petróleo.

Eje Central Lázaro Cárdenas 152. 07730, México, D.F. México.

Resumen

Debido a la generación de moléculas a lo largo de los reactores de lecho transportado durante la desintegración catalítica de hidrocarburos pesados, disminuye la densidad y se incrementa la velocidad de la mezcla reactiva. Esta situación provoca un cambio en dirección axial de la velocidad relativa del catalizador respecto a la de la mezcla reactiva evaporada y, consecuentemente, variación continua de los coeficientes de transferencia de masa y calor entre la fase gaseosa y la superficie del catalizador. Estos cambios en los coeficientes afectan a la velocidad efectiva de las reacciones de desintegración. Utilizando un modelo matemático para un reactor ascendente de desintegración catalítica, en el cual se considera explícitamente variación en la velocidad de gases, de catalizador y en la densidad de la mezcla reactiva, se hace un análisis del cambio que exhiben los coeficientes de transferencia. Es importante hacer notar que el coeficiente de transferencia de masa puede variar hasta un 50% a lo largo del reactor. El coeficiente de transferencia de calor exhibe variaciones del orden del 11%.

Palabras clave: desintegración catalítica, modelado matemático, reactor de lecho transportado, coeficiente de transferencia de calor, coeficiente de transferencia de masa.

Abstract

Due to molecules generation during the catalytic cracking of heavy hydrocarbons in riser reactors, the density of the reactive mixture decreases and its velocity increases. This situation provokes axial variation of the slip velocity between the catalytic particles and the reactive mixture and consequently, the continuous variation of heat and mass transfer coefficients. These changes affect the effective reaction rate. In this work, using a mathematical model for a catalytic cracking riser reactor, which considers explicitly the variation of the reactive mixture density, an analysis of the changes exhibit by transport coefficients is performed. It is important to note that mass transfer coefficient values can change up to 100% along the riser. Values for the heat transfer coefficient changes about 11%.

Keywords: catalytic cracking, heat transfer coefficient, mass transfer coefficient, mathematical modelling, riser reactor.

1. Introducción

El proceso de desintegración catalítica se lleva a cabo en reactores de lecho transportado conocidos como “risers” o “elevadores”. La carga líquida precalentada (generalmente gasóleos de vacío) y el catalizador caliente (proveniente del regenerador) son suministrados en la parte inferior del reactor. Al contacto entre ambas fases, la carga líquida se evapora instantáneamente, iniciando su

desintegración y la producción de gran cantidad de moléculas de peso molecular menor al de la carga, disminuyendo la densidad de la mezcla reactiva e incrementando la velocidad en dirección axial. En el reactor aparecen dos regiones: una en la base que se distingue por la aceleración del catalizador, la otra, con un flujo del catalizador totalmente desarrollado que permanece hasta la salida de la mezcla reactiva y del catalizador del reactor. Durante

*Autor para la correspondencia. E-mail: rmaya@imp.mx
Tel. (55) 30038017. Fax. (52) 30038429.

el recorrido el catalizador viaja a una velocidad menor a la mezcla reactiva (conocida como velocidad de deslizamiento o “*slip*”) debido a la diferencia de densidad de las fases (Vendersbosch y col., 1999).

El objetivo del presente trabajo es modelar sistema reaccionante considerando explícitamente la presencia de las fases sólida (catalizador) y gaseosa (mezcla reactiva) y, a través del uso de correlaciones fundamentales aceptadas, seguir el cambio de los coeficientes de transferencia a lo largo del reactor, a consecuencia principalmente del cambio de densidad de la mezcla reactiva.

2. Desarrollo teórico

El modelo del reactor incluye un esquema cinético de 5 pseudocompuestos (Maya Yescas y López Isunza, 1993), los balances de masa para las especies reaccionantes y el balance de energía. La desintegración de la carga sigue un esquema de segundo orden, en tanto que las reacciones de desintegración de las especies generadas son de primer orden. La dependencia de la velocidad de reacción con la temperatura toma la forma típica de Arrhenius (Van Landeghem y col., 1995; Sungungun y col., 1998). El modelo considera como la entrada del reactor al punto donde se encuentran la carga líquida, con el catalizador. La carga se precalienta a una temperatura en el intervalo de 430 K a 490 K, y el catalizador en el intervalo de 935 K a 945 K. Al contacto se provoca la evaporación instantánea de la carga, obteniéndose una mezcla de hidrocarburos y catalizador con una temperatura en el intervalo de 815 K a 835 K.

Esta mezcla reacciona de modo heterogéneo generando moléculas, y sale del reactor con una temperatura en el intervalo de 790 K a 810 K. Las características del modelo utilizado son:

- Al reactor se le considera de lecho transportado y heterogéneo.

- Ambas fases se desplazan en flujo pistón.
- La carga se evapora y se mezcla con el catalizador de modo espontáneo.
- El reactor no tiene salidas ni entradas laterales.
- Las reacciones de desintegración son únicamente catalíticas.
- La mezcla gaseosa es ideal.
- El gas disminuye su densidad debido a la generación de moléculas de peso molecular menor por las reacciones de desintegración.

A continuación se describe el modelo matemático del reactor de desintegración. Las variables y sus unidades se definen al fin del artículo. La densidad de la mezcla gaseosa en cualquier punto del reactor es:

$$\rho_G = C_{REF} \sum_i \xi_i PM_i \quad (1)$$

La velocidad de la mezcla reactiva es:

$$v_G = \frac{m_G}{\rho_G A_T \varepsilon} \quad (2)$$

La corriente de las partículas del catalizador se acelera debido al arrastre provocado por la mezcla evaporada y el efecto de retención por acción de la gravedad, alcanzando una velocidad (terminal o de Stokes) constante y ligeramente menor a la de la mezcla reactiva (McCabe y Smith, 1976; Bolkan-Kenny y col., 1994).

$$v_T = v_G - v_p = \sqrt{\frac{2g(\rho_p - \rho_G)m_{CAT}}{A_T \rho_p C_D \rho_G}} \quad (3)$$

El coeficiente de arrastre C_D que aparece en la Ec. 3 está en función del número de Reynolds de partícula, Re_p . Sus valores se obtienen de las siguientes correlaciones (Bird y col., 1960; McCabe y Smith, 1976):

$$2 < Re_p < 500 \quad C_D = \frac{18.5}{Re_p^{0.6}} \quad (4)$$

$$500 < Re_p < 200000 \quad C_D = 0.44 \quad (5)$$

Aquí, el número de Reynolds de partícula se calculó como:

$$Re_p = \frac{d_p^3 g \rho_G (\rho_p - \rho_G)}{18 \mu_G^2} \quad (6)$$

La fracción volumétrica ocupada por la fase gaseosa en cualquier punto del reactor es:

$$\varepsilon = \frac{1}{1 + \left(\frac{m_{CAT}}{m_G} \right) \left(\frac{\rho_G}{\rho_P} \right)} \quad (7)$$

El balance de masa para cualquier especie A en fase gaseosa es:

$$v_G \frac{dC_{A(G)}}{dz} + k_G a_v \left(C_{A(G)} - \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} C_{A(P)} \right) = 0 \quad (8)$$

$$C.I. \quad C_{A(G)}(z=0) = C_{A(G)}^0 \quad (8.1)$$

El balance de masa para cualquier especie A en la superficie catalítica es:

$$v_P \frac{dC_{A(P)}}{dz} - k_G a_v \left(\frac{\varepsilon}{1-\varepsilon} C_{A(G)} - C_{A(P)} \right) = \Phi R_j \quad (9)$$

$$C.I. \quad C_{A(P)}(z=0) = C_{A(P)}^0 \quad (9.1)$$

El balance de energía para la fase gaseosa es

$$v_G \frac{dT_G}{dz} + \frac{h_G a_v}{\rho_G C_{P(G)}} \left(T_G - \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} T_P \right) = 0 \quad (10)$$

$$C.I. \quad T_G(z=0) = T_G^0 \quad (10.1)$$

El balance de energía en la superficie del catalizador es:

$$v_P \frac{dT_P}{dz} - \frac{h_G a_v}{\rho_G C_{P(P)}} \left(\frac{\varepsilon}{1-\varepsilon} T_G - T_P \right) = \frac{\Phi \sum_j (-\Delta H_r)_j R_j}{C_{P(P)}} \quad (11)$$

$$C.I. \quad T_P(z=0) = T_P^0 \quad (11.1)$$

La función de desactivación del catalizador es:

$$\Phi = \frac{1}{1 + \alpha y_{Coque}} \quad (12)$$

En los lechos transportados, la transferencia de calor es resultado de los mecanismos de conducción y convección, principalmente. Una forma posible para calcular el coeficiente de transferencia de calor (Brodkey y Hershey, 1988) es:

$$h_G = 0.6 \frac{k_{(G)}}{d_p} Pr^* Re^{1/3} \quad (13)$$

Donde se utilizó la definición del número de Nusselt (Ec. 14) y su correlación con los números de Prandtl y Reynolds (Ec. 15 y 16). Es importante notar que el número de Reynolds se evaluó utilizando el valor de la velocidad terminal de partícula, v_T .

$$Nu = \frac{h_G d_p}{k_{(G)}} \quad (14)$$

$$Pr = \frac{C_{P(G)} \mu_G}{k_{(G)}} \quad (15)$$

$$Re = \frac{d_p v_T \rho_G}{\mu_G} \quad (16)$$

El calculo del coeficiente de transferencia de masa se realizó de manera análoga:

$$k_G = (0.51) \left(\frac{G}{\rho_G PM_G} \right) \text{Re}^{-0.41} Sc^{-2/3} \quad (17)$$

En donde G es el gasto en masa por unidad de área, evaluado a v_T y Sc es el número de Schmidt:

$$Sc = \frac{\mu_G}{\rho_G D_V} \quad (18)$$

Resultados y discusión

El modelo presentado se resolvió utilizando un método Runge-Kutta de 4° orden en una computadora tipo PC. Los resultados de la integración de las ecuaciones se presentan en las siguientes figura. La densidad de la mezcla reactiva disminuye mientras avanza por la dirección axial del reactor (Fig. 1), debido a la generación de moles. Se puede notar que el cambio de densidad es muy importante al inicio del reactor, que es donde se lleva a cabo la mayor parte de la reacción catalítica, ya que ahí es donde hay más carga disponible y el catalizador está más activo, y continua a lo largo de todo el lecho.

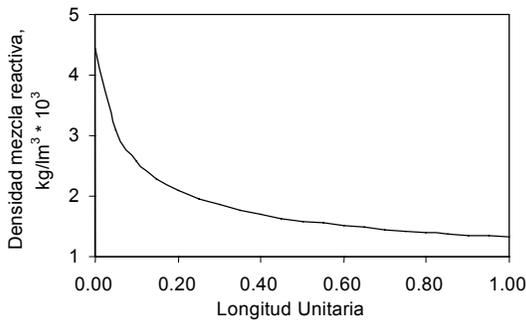


Fig. 1. Cambio de densidad de la mezcla gaseosa en un reactor de desintegración catalítica.

La generación de moles y la consecuente disminución de la densidad gaseosa, provocan que la velocidad de la mezcla reactiva se incremente (Fig. 2) y, simultáneamente, por arrastre se incrementa la velocidad del catalizador.

En el recuadro (Fig. 2) se observa el perfil de velocidad terminal (v_T) entre la mezcla reactiva y el catalizador.

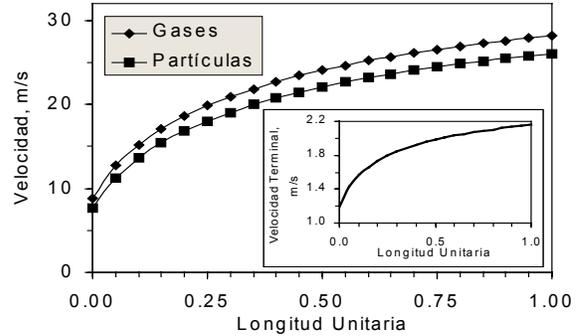


Fig. 2. Perfil de la velocidad de la mezcla reactiva y del catalizador a lo largo del reactor de desintegración. En el recuadro v_T .

Como se puede esperar de la forma de las correlaciones para los coeficientes de transferencia, tanto el coeficiente de transferencia de calor como el de masa disminuyen a lo largo del reactor (Fig. 3). Análogo al cambio de velocidad, el cambio en los coeficientes es más rápido al inicio del reactor. Esta situación provoca que la velocidad efectiva de reacción se vea disminuida por la menor transferencia de masa entre las fases, además de los efectos cinéticos de desactivación catalítica.

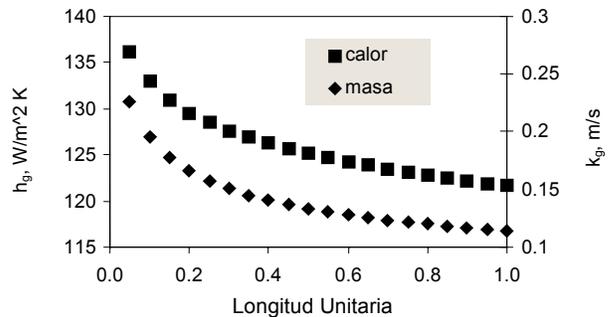


Fig. 3. Cambio de los coeficientes de transferencia de masa y de calor a lo largo del reactor de desintegración catalítica.

El punto más importante a notar en la Fig. 3 es que el coeficiente de transferencia de calor no cambia más de un 11% bajo las condiciones simuladas; sin embargo, el coeficiente de transferencia de masa exhibe cambios que alcanzan un 50% del valor original. De ahí la gran importancia de considerar a estos parámetros del modelo como variables y no como constantes durante la simulación de este tipo de sistemas.

Conclusiones

Los coeficientes de transferencia de masa y calor tienen un efecto directo en la velocidad efectiva de desintegración. Estos coeficientes cambian de manera sensible debido a los cambios de densidad y velocidad de la mezcla reactiva, consecuencia de la generación de moles por las reacciones de desintegración. Hasta muy recientemente ha sido una práctica común en ingeniería química, considerar a estos coeficientes constantes. Se sugiere que al estudiar unidades FCC se considere explícitamente el cambio de los coeficientes de transferencia, a fin de obtener resultados adecuados al modelar este tipo de sistemas. Es importante notar que el más afectado por el cambio de la densidad de la mezcla es el coeficiente de transferencia de masa, el cual puede exhibir un decremento del orden del 50%.

Agradecimientos

Al Instituto Mexicano del Petróleo por el apoyo financiero a través del Proyecto FIES-98-111-II, en colaboración con la UAM-A. Así mismo al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por la beca crédito No. 157615 a EFVM.

Nomenclatura

Símbolos latinos

A_T	Área transversal del reactor (m^2)
a_V	Área superficial de partícula (m^2/m^3)

$C_{A(G)}$	Concentración en fase gaseosa del pseudocompuesto "A" ($kmol/m^3$)
$C_{A(G)}^0$	Concentración inicial en fase gaseosa del pseudocompuesto "A" ($kmol/m^3$)
$C_{A(P)}$	Concentración en la superficie sólida del pseudocompuesto "A" ($kmol/m^3$)
$C_{A(P)}^0$	Concentración inicial en la superficie sólida del pseudocompuesto "A" ($kmol/m^3$)
C_{REF}	Concentración molar de referencia ($kmol/m^3$)
$C_{P(P)}$	Calor específico del catalizador ($kJ / kg K$)
$C_{P(G)}$	Calor específico del gasóleo ($kJ/kg K$)
d_P	Diámetro de partícula (m)
D_V	Coefficiente de difusividad (m^2/s)
g	Aceleración de la gravedad (m/s^2)
G	Flux de gas ($kg/m^2 s$)
h_G	Coefficiente de transferencia de calor ($kJ/m^2 s$)
k_G	Coefficiente de transferencia de masa (m/s)
$k_{(G)}$	Conductividad térmica fase gaseosa ($W/m K$)
m_{CAT}	Gasto en masa del catalizador (kg/s)
m_G	Gasto en masa del gasóleo (kg/s)
PM_j	Masa molecular del pseudocompuesto j de la desintegración ($kg/kmol$)
R_j	Velocidad de reacción del pseudocompuesto "A" ($kmol/m^3 s$)
T_G	Temperatura de la fase gaseosa (K)
T_P	Temperatura de la superficie catalítica (K)
v_G	Velocidad de la fase gaseosa (m/s)
v_P	Velocidad de partícula (m/s)
v_T	Velocidad terminal de partícula (m/s)
y_{Coque}	Rendimiento a coque ($\%p$)
z	Variable axial del reactor (m)

Símbolos griegos

α	Coefficiente de actividad catalítica (Adimensional)
----------	---

$(\Delta H_r)_j$	Entalpía de reacción de formación del pseudocompuesto j (kJ/kg)
ε	Fracción volumétrica ocupada por la fase gaseosa (m^3/m^3)
ξ_i	Fracción molar del pseudocompuesto i (Adimensional)
ρ_G	Densidad de la fase gaseosa (kg/m^3)
ρ_p	Densidad de la partícula de catalizador (kg/m^3)
μ_G	Viscosidad de la fase gaseosa ($\text{kg}/\text{m s}$)

Referencias

- Bird, R.B., Stewart, W.E. y Lightfoot, E.N. (1960). *Transport Phenomena*. John Wiley & Sons, Nueva York.
- Bolkan-Kenny, Y.G., Pugsley, T.S. y Berruti, F. (1994). Computer simulation of the performance of fluid catalytic cracking risers and downers. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 33, 3043-3052.
- Brodkey, R.S. y Hershey, H.C. (1988). *Transport Phenomena a Unified Approach*. McGraw-Hill, Nueva York.
- Maya-Yescas, R. y López-Isunza, F. (1993). Un esquema cinético para el craqueo catalítico de gasóleos en un reactor de lecho transportado. *Avances en Ingeniería Química* 14, 39-43.
- McCabe, W. L. y Smith, J. C. (1976). *Unit Operations of Chemical Engineering*. 3^a ed. McGraw-Hill, Nueva York.
- Sugungun, MM, Kolesnikov, IM, Vinogradov, V.M. y Kolesnikov, SI. (1998). Kinetic modelling of FCC process. *Catalysis Today* 43, 315-325.
- Van Landeghem, F., Nevicato, D., Pitault, I., Forissier, M., Turlier, P., Dorouin, C. y Bernard, J.R. (1996). Fluid catalytic cracking: modelling of an industrial riser. *Applied Catalysis A: General* 138, 381-405.
- Vendersbosch, R.H., Prins, W. y Swaij, W.P.M. (1999). Mass transfer and influence of the local catalyst activity on the conversion in a riser reactor. *Canadian Journal Chemical Engineering* 77, 262-274.