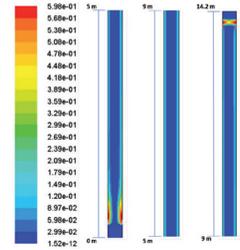


# Análisis numérico de la variación de velocidad superficial del gas y del flujo másico de sólidos en un riser de craqueo catalítico fluido

## Numerical analysis for the gas superficial velocity and solid mass flow variation in a fluid catalytic cracking riser



Ignacio Paz-Paredes<sup>1,2</sup>, Juan Gabriel Barbosa-Saldaña<sup>1</sup>, Luis Alfonso Moreno-Pacheco<sup>1</sup>, Claudia del Carmen Gutiérrez-Torres<sup>1</sup>, José Alfredo Jiménez-Bernal<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Instituto Politécnico Nacional ESIME-UPALM. Av. Instituto Politécnico Nacional, s/n. Edif. 5. Col. Lindavista - 07738. México D.F. (México).  
<sup>2</sup> Instituto Mexicano del Petróleo. Dirección de Servicios de Ingeniería. Eje Central Lázaro Cárdenas, 152 - 07730 México D.F. (México).

DOI: <http://dx.doi.org/10.6036/7567> | Recibido: 26/02/2015 • Aceptado: 08/07/2015

### ABSTRACT

The gas-solid flow has been considered in many industrial processes due its high capacity for transferring mass, momentum and energy. At the petroleum refining industry, the Fluid Catalytic Cracking process (FCC) is one of the most relevant because vacuum gas-oil is converted into lighter compounds, like gasoline, by means of cracking reactions in the riser, where the atomized and vaporized gas-solid flow is combined with a fluidized solid catalyst. The gas-solid flow formulation is no easy due to the phase to phase, and phase to riser walls interactions presented in the flow. Since 30 years ago several Computational Fluid Dynamics (CFD) efforts have been developed oriented to understand and reproduce the biphasic flow behavior.

In this paper the mass and momentum balance equations, a drag model, and constitutive equations are joined in a CFD model in order to compute the solid phase's properties, and phase's interaction in an air solid catalyst system. By means of a parametric study the hydrodynamics of the flow varying the air superficial velocity and the solid catalyst flow at the riser inputs are performed to confirm the CFD model capability to predict the annular flow pattern and then, in the future to be able to apply this model to gas oil-steam-catalyst system's analysis. It is confirmed that the proposed model properly predicts the annular flow pattern for every operation condition case analyzed.

**Keywords:** CFD, CFB, Eulerian-Granular Model, FCC process, KTGF, riser.

En el presente trabajo se propone un modelo CFD formado por las ecuaciones fundamentales de balance de masa y momentum, un modelo de arrastre, y las ecuaciones constitutivas para calcular las propiedades de los sólidos, y la interacción de las fases para un sistema aire-catalizador; y se realiza un estudio paramétrico de la hidrodinámica del flujo, variando la velocidad superficial del aire y el flujo del catalizador en las entradas del riser para confirmar la capacidad del modelo para reproducir el patrón de flujo anular, y a futuro aplicarlo a la modelación de un sistema gasóleo-vapor-catalizador. Se confirma que el modelo propuesto predice adecuadamente la formación de patrón de flujo núcleo-anular en todas las diferentes condiciones de operación analizadas.

**Palabras clave:** CFD, CFB, Modelo Euleriano-Granular, KTGF, proceso FCC, riser.

### 1. INTRODUCCIÓN

El Proceso de *Craqueo Catalítico en Lecho Fluidizado* (Proceso FCC) es uno de los más importantes dentro de la industria de refino del petróleo debido principalmente a que transforma gasóleo de vacío de alto peso molecular en productos más ligeros como son: gas seco, gasolina, y aceite cíclico ligero. El proceso se lleva a cabo en un tubo vertical denominado riser; donde el catalizador en forma de partículas fluidizadas se pone en contacto con el gasóleo líquido atomizado, y conforme ascienden juntos por el riser se efectúan las reacciones catalíticas que dan lugar a los productos antes mencionados.

Desde hace 30 años los *lechos fluidizados circulantes* (CFB) han sido usados en diversas industrias tales como: la industria química, petroquímica, metalúrgica, farmacéutica, y en las industrias de generación de energía [1]. Debido a su gran importancia, se han realizado un amplio número de estudios enfocados en estos sistemas reaccionantes. La mayoría de los estudios mencionados se han orientado principalmente al análisis de la hidrodinámica de los sistemas con el fin de entender el comportamiento del flujo gas-sólido. De los experimentos se ha podido observar que conforme se incrementa la velocidad superficial del gas, el flujo gas-sólido pasa gradualmente por diferentes patrones: burbujeante, turbulento, fluidización rápida, y transporte neumático [2].

La hidrodinámica del flujo multifásico gas-sólido ha sido estudiada numéricamente por diversos investigadores. El objetivo principal de estos estudios ha sido predecir la distribución y la velocidad de los sólidos en las direcciones radial y axial dentro del riser usando la *Dinámica de Fluidos Computacional* (CFD). Uno de

### RESUMEN

El flujo gas-sólido ha sido aplicado en varios procesos de diversas industrias debido a su gran capacidad de transferencia de masa, momentum y energía. En la industria del refino del petróleo, el Proceso de Craqueo Catalítico (Proceso FCC) es uno de los más relevantes, ya que en él, el gasóleo de vacío se transforma en compuestos más ligeros como gasolina a través de reacciones de craqueo en el riser (reactor vertical elevador), donde se presenta el flujo gas-sólido formado por el gasóleo atomizado y vaporizado y el catalizador sólido fluidizado con vapor. La modelación hidrodinámica del flujo gas-sólido es muy complicada, ya que existen diversas interacciones entre las fases, y entre las fases y las paredes del riser. Por ello, desde hace aproximadamente 30 años se han desarrollado varios modelos de la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) orientados a su comprensión y reproducción.

los primeros trabajos de análisis numérico usando un programa comercial fue hecho por Benyahia et al [3]; quienes usaron el programa CFX para modelar el flujo gas-sólido en un *Lecho Fluidizado Circulante* (CFB), este trabajo junto con el realizado por Kuipers et al [4]; ambos presentados en el congreso de Fluidization IX en 1998; demostraron que los códigos CFD habían alcanzado la madurez suficiente para poder ser usados para predecir el comportamiento de los flujos gas-sólido.

En el Proceso FCC el régimen más frecuentemente presente del flujo gas-sólido es el de fluidización rápida, el cual presenta una región diluida de sólidos en la parte superior del riser y una región densa de sólidos en la parte inferior del mismo, además de una zona densa en sólidos cerca de las paredes donde los sólidos fluyen hacia abajo mientras que en el centro del riser fluye la mayoría del gas de fluidización hacia arriba, donde también se presenta una zona diluida en sólidos. A este patrón de flujo se le conoce como núcleo-anular (core-annular), y es un patrón de flujo desfavorable que produce una distribución de sólidos no homogénea dentro del riser [2, 5-6].

A medida que las computadoras de alto rendimiento y los métodos numéricos y algoritmos han alcanzado un desarrollo maduro, la CFD se ha convertido en una herramienta poderosa para analizar sistemas de flujo multifásicos. Al principio el análisis del flujo granular se realizó en un riser de 1D a fin de predecir la concentración de sólidos, sin considerar la distribución radial del mismo, situación que impidió predecir el patrón de flujo núcleo-anular (Li y Kwauk [13], 1980; Kunni and Levespiel [14], 1991). Sin embargo, en los últimos 30 años se han realizado investigaciones analizando varios casos [7-11], y se ha confirmado que combinando un modelo CFD en 2D y la *Teoría Cinética del Flujo Granular* (KTGF) es posible reproducir con buena precisión el comportamiento del flujo gas-sólido.

Para obtener un modelo CFD validado el primer paso es reproducir adecuadamente el patrón del flujo anular gas-sólido, y esto último es el objetivo principal de este trabajo; por lo que se establecen diferentes condiciones de velocidad superficial del gas de fluidización y de flujo másico de sólidos, y se analizan las concentraciones radiales y las velocidades de los sólidos a diferentes coordenadas axiales. A continuación se desarrolla el modelo matemático para posteriormente introducir el proceso numérico y el dominio computacional y finalmente los resultados y su respectiva discusión.

## 2. MODELO DE LA DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL

Las ecuaciones que forman el modelo CFD para simular la hidrodinámica del Proceso FCC son muy complejas, y esto hace imposible que se obtenga una solución analítica de las mismas, por lo que se hace necesaria una solución aproximada a través de métodos numéricos. En el presente trabajo las ecuaciones fundamentales de balance de masa y momentum, así como las ecuaciones constitutivas se resuelven por el método de volúmenes finitos. El sistema analizado es claramente turbulento, por lo que se utiliza el modelo  $\kappa$ - $\epsilon$  para predecir las fluctuaciones de dirección y velocidad de las fases y la mezcla.

Las ecuaciones constitutivas usadas para calcular las propiedades de la fase sólida, y las interacciones entre fases, provienen de la Teoría Cinética del Flujo Granular (KTGF) descrita por Gidaspow [15].

Uno de los parámetros más relevantes que afectan el comportamiento del flujo gas-sólido es el intercambio de momentum entre la fase gaseosa y la fase sólida. En este trabajo se utiliza el modelo de arrastre de Syamlal y O'Brien [16, 17] como primera

aproximación, ya que en varios trabajos realizados previamente por diferentes autores [2, 4-12] se ha podido comprobar que este modelo predice adecuadamente el patrón de flujo núcleo-anular típico en un riser en lechos fluidizados circulantes como en el Proceso FCC, y a que este trabajo se trata de un estudio paramétrico. Para realizar predicciones más cuantitativamente correctas a futuro se usarán modelos más complejos que predicen la formación grupos (clusters) de partículas, y que requieren el desarrollo de subrutinas de usuario (UDF) integradas al solucionador Fluent de ANSYS®.

Para obtener la solución del modelo CFD propuesto se utiliza una aproximación Euleriana-Euleriana, la cual se considera como un modelo de dos fases totalmente inter-penetradas. Razón por la cual las ecuaciones de balance en cada fase se pueden resolver de forma simultánea. A continuación se presenta las ecuaciones de balance, las ecuaciones constitutivas, y las ecuaciones del modelo de turbulencia  $\kappa$ - $\epsilon$  realizable [18] que forman el modelo CFD propuesto [11].

### A. Ecuaciones de balance

Balance de masa

Fase gas

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_g \rho_g) + \nabla \cdot (\epsilon_g \rho_g \mathbf{v}_g) = 0 \quad (1)$$

Fase sólida

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_s \rho_s) + \nabla \cdot (\epsilon_s \rho_s \mathbf{v}_s) = 0 \quad (2)$$

Balance del momentum

Fase gas

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_g \rho_g \mathbf{v}_g) + \nabla \cdot (\epsilon_g \rho_g \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g) = -\epsilon_g \nabla P + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_g + \epsilon_g \rho_g \mathbf{g} - \beta_{gs}(\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s) \quad (3)$$

Fase sólida

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_s \rho_s \mathbf{v}_s) + \nabla \cdot (\epsilon_s \rho_s \mathbf{v}_s \mathbf{v}_s) = -\epsilon_s \nabla P + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_s - \Delta p_s + \epsilon_s \rho_s \mathbf{g} + \beta_{gs}(\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s) \quad (4)$$

Balance de la energía fluctuante de la fase sólida

$$\frac{3}{2} \left[ \frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_s \rho_s \theta) + \nabla \cdot (\epsilon_s \rho_s \theta \mathbf{v}_s) \right] = (-\nabla p_s \bar{\mathbf{I}} + \boldsymbol{\tau}_s) : \nabla \mathbf{v}_s + \nabla \cdot (\kappa_s \nabla \theta) - \gamma_s + \phi_s \quad (5)$$

### B. Ecuaciones constitutivas

Esfuerzo cortante de la fase gas

$$\boldsymbol{\tau}_g = \epsilon_g \mu_g [\nabla \mathbf{v}_g + (\nabla \mathbf{v}_g)^T] - \frac{2}{3} \epsilon_g \mu_g (\nabla \cdot \mathbf{v}_g) \mathbf{I} \quad (6)$$

Esfuerzo cortante de la fase sólida

$$\boldsymbol{\tau}_s = \epsilon_s \mu_s [\nabla \mathbf{v}_s + (\nabla \mathbf{v}_s)^T] + \epsilon_s \left( \xi_s - \frac{2}{3} \mu_s \right) \nabla \mathbf{v}_s \cdot \mathbf{I} \quad (7)$$

Disipación por colisiones de la energía fluctuante de la fase sólida

$$\gamma_s = 3(1 - e^2)\epsilon_s^2 \rho_s g_0 \theta \left( \frac{4}{d_p} \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} \right) \quad (8)$$

Función de distribución radial

$$g_0 = \left[ 1 - \left( \frac{\epsilon_s}{\epsilon_{s,max}} \right)^{1/3} \right]^{-1} \quad (9)$$

Presión de la fase sólida

$$p_s = \epsilon_s \rho_s \theta [1 + 2g_0 \epsilon_s (1 + e)] \quad (10)$$

Viscosidad de cizalla de la fase sólida

$$\mu_s = \frac{4}{5} \epsilon_s \rho_s d_p g_0 (1 + e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} + \frac{10 \rho_s d_p \sqrt{\pi \theta}}{96(1 + e) g_0 \epsilon_s} \left[ 1 + \frac{4}{5} g_0 \epsilon_s (1 + e) \right]^2 \quad (11)$$

Viscosidad promedio de la fase sólida

$$\xi_s = \frac{4}{3} \epsilon_s \rho_s d_p g_0 (1 + e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} \quad (12)$$

Intercambio de energía fluctuante entre las fases gas y sólida

$$\phi_s = -3\beta_{gs}\theta \quad (13)$$

Modelo de arrastre

El coeficiente de arrastre se define como [14,15] (Syamlal y O'Brien, 1989; Syamlal, 1998):

$$\beta_{gs} = \frac{3 \epsilon_s \epsilon_g \rho_g}{4 v_{r,s}^2 d_p} C_{DO} \left( \frac{Re_s}{v_{r,s}} \right) |v_s - v_g| \quad (14)$$

Dónde:

$$C_{DO} = \left( 0.63 + \frac{4.8}{\sqrt{Re_s/v_{r,s}}} \right) \quad (15)$$

Este modelo se basa en la definición de la velocidad terminal de la fase sólida en lechos fluidizados o fijos, usando correlaciones para la fracción volumétrica y el número de Reynolds relativo y donde  $v_{r,s}$  es la velocidad terminal de la fase sólida, definida como:

$$v_{r,s} = 0.5 \left( A - 0.06 Re_s + \sqrt{(0.06e)^2 + 0.12 Re_s (2B - A) + A^2} \right) \quad (16)$$

Dónde:

$$A = \epsilon_g^{4.14}; \text{ y } B = 0.8 \epsilon_g^{1.28} \text{ cuando } \epsilon_g \leq 0.85 \quad (17)$$

Y

$$A = \epsilon_g^{4.14} \text{ y } B = \epsilon_g^{2.65} \text{ cuando } \epsilon_g > 0.85 \quad (18)$$

C. Modelo de turbulencia  $\kappa$ - $\epsilon$  realizable [18]:

Generalmente, los riser en lechos fluidizados circulantes operan bajo un régimen turbulento. Por lo tanto, es importante utilizar un modelo de turbulencia adecuado para describir las fluctuaciones turbulentas de las velocidades y de las variables escalares. En este trabajo se usa el modelo de turbulencia  $\kappa$ - $\epsilon$  para describir los movimientos turbulentos de cada fase. En este modelo la viscosidad turbulenta  $\mu_t$  se define como:

$$\mu_t = \rho_i C_\mu \frac{\kappa_i^2}{\epsilon_i} \quad (19)$$

La energía cinética turbulenta  $\kappa$  y su velocidad de disipación  $\epsilon$ , se calculan a través de las ecuaciones de transporte (20) y (21):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_i \epsilon_i \kappa_i) + \nabla \cdot (\rho_i \epsilon_i \kappa_i u_i) \\ = \nabla \cdot \left( \epsilon_i \frac{\mu_t}{\sigma_\kappa} \nabla \kappa_i \right) + (\epsilon_i G_\kappa - \epsilon_i \rho_i \epsilon_i) \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\epsilon_i \rho_i \epsilon_i) + \nabla \cdot (\rho_i \epsilon_i \epsilon_i u_i) \\ = \nabla \cdot \left( \epsilon_i \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \nabla \epsilon_i \right) + \frac{\epsilon_i}{\kappa} (C_{1\epsilon} \epsilon_i G_\kappa - C_{2\epsilon} \epsilon_i \rho_i \epsilon_i) \end{aligned} \quad (21)$$

Donde  $G_\kappa$  es la generación de energía cinética turbulenta debida a los gradientes de la velocidad promedio,  $C_{1\epsilon}$  y  $C_{2\epsilon}$  son constantes, y  $\sigma_\kappa$  y  $\sigma_\epsilon$  son los números de Prandtl para  $\kappa$  y  $\epsilon$ , respectivamente. Para mayor detalle del modelo se puede consultar la referencia [18].

D. Cálculo de la velocidad de la fase sólida en las entradas del riser para cumplir con la especificación del flujo másico.

La velocidad de los sólidos ( $v_s$ ) en las entradas del riser fue calculada para asegurar que el flujo másico especificado en la Tabla 1 se cumpla, y para ello se utiliza la expresión (22) (Benyahia, et al [8]):

$$v_s = \frac{G_s A_r}{\rho_s \epsilon_s A_i} \quad (22)$$

Donde  $G_s$  es el flujo másico de sólidos en el riser,  $A_r$  el área del riser, y  $A_i$  área de cada entrada de los sólidos, mientras que  $v_s$ ,  $\rho_s$  y  $\epsilon_s$  son la velocidad, densidad y fracción volumétrica de los sólidos a la entrada del riser, respectivamente.

En una geometría cartesiana de 2D, se considera que el riser tiene una dimensión Z tendiente a cero, de tal forma que ninguna de las variables presenta cambio en esa dirección. Entonces, el área del riser se define como  $A_r = 0.2 \Delta Z$ , siendo 0.2 el diámetro del riser, y  $\Delta Z$  un ancho unitario del riser, y la velocidad de los sólidos requerida se calcula con la ecuación (23), donde  $A_i = 2 (0.1) \Delta Z$ .

$$v_s = \frac{G_s (0.2 \Delta Z)}{(1712)(0.6)2(0.1 \Delta Z)} = \frac{G_s}{(1712)(0.6)} \quad (23)$$

## 2.1. DESCRIPCIÓN DEL SISTEMA Y DEL DOMINIO COMPUTACIONAL

La geometría analizada en este trabajo está basada en el trabajo experimental de Knowlton et al [19], el cual realizó en un riser con 0.2 m de diámetro y 14.2 m de alto, usando como partículas sólidas catalizador del Proceso FCC con un diámetro de 76  $\mu$ m, y una densidad de 1,712 kg/m<sup>3</sup>; y como gas, aire.

Debido a que en este trabajo se pretende confirmar la capacidad del modelo propuesto para predecir el patrón de flujo anular a diferentes condiciones de operación a través de un estudio paramétrico; se propone utilizar una geometría en 2D. Peirano et al. [20] establece que las simulaciones en 2D pueden ser usadas para estudios de sensibilidad, mientras que Li et al. [21] establecen que son adecuadas para realizar estudios cualitativos. Esta es una primera aproximación a la modelación de este tipo de sistemas, la cual servirá como base para que en trabajos futuros se evalúen otros modelos de turbulencia y modelos de arrastre más complejos; así como la conveniencia de analizar este sistema a través de una simulación en 3D.

La geometría del riser para este estudio se muestra en la Fig. 1 y se basa en la propuesta de Benyahia et al [8]; la cual tiene una configuración de dos entradas laterales y dos salidas laterales. Se propone esta geometría ya que se ha observado que una configuración de una entrada y una salida, no es capaz de capturar el mezclado de fases a lo largo del riser [9].

El aire de fluidización entra por el fondo del riser. Las partículas de catalizador ingresan al riser a través de las entradas laterales de 0.1 m de diámetro, localizadas 0.3 m por encima del fondo del mismo. La mezcla aire-partículas de catalizador se mueven en forma ascendente dentro del riser y salen a través de dos salidas laterales de 0.1 m de diámetro, localizadas 0.3 m por debajo de la parte superior del riser. Las condiciones adicionales de la simulación de los casos de estudio se resumen en la Tabla 1 [22].

Parámetro	Casos de estudio			
	PS1	PS2	PS3	PS4
$G_s, \text{kg/m}^2 \text{ s}$	455	355	325	254
$v_g, \text{m/s}$	8	6	4	8
$v_s, \text{m/s}$	0.443	0.346	0.316	0.247

Tabla 1: Listado de condiciones de operación<sup>1</sup>

El dominio computacional de este estudio se muestra en la Fig. 2. El mallado propuesto consta de 19 celdas uniformes en la dirección radial y 285 celdas no uniformes en la dirección axial, teniendo un total de 5,415 celdas. El análisis de independencia de malla se realiza aumentando el número de celdas en cada dirección, y confirmando que los valores de las variables analizadas no cambian significativamente. Para el caso del presente trabajo el mallado de prueba se define con 29 celdas uniformes en la dirección radial, y 428 celdas no uniformes en la dirección axial, para un total de 12,412 celdas.

Para la simulación se utiliza un tamaño de paso de integración en el tiempo de 1 ms, y el análisis se hace para un tiempo final de 40 s. Como primera etapa se permitió que la simulación completara 20 s monitoreando las variables cada 0.2 s, definiendo un punto de monitoreo sobre una línea a 3.9 m desde la base del riser en la dirección axial, en el cual se recuperan los valores promedio de las variables analizadas a cada intervalo de tiempo especificado. En la Fig. 3 se muestra la curva de convergencia de la fracción volumétrica de los sólidos, mientras que en la Fig. 4 se muestra la convergencia de la velocidad axial de los sólidos.

En la Fig. 3 se puede observar que la fracción volumétrica alcanza una tendencia estable a aproximadamente 10 s de iniciada la simulación, y a partir de ese tiempo la variable se comporta

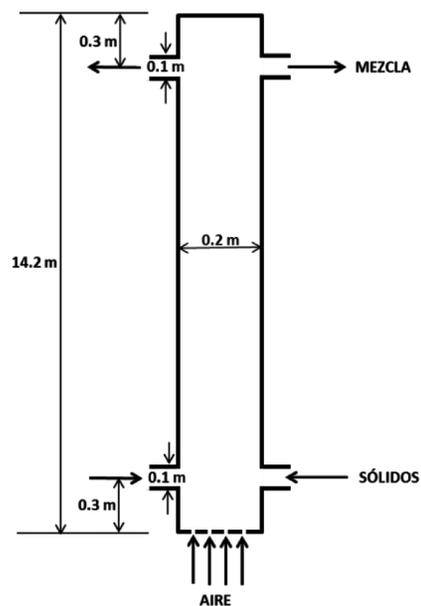


Figura 1: Esquema del riser del Proceso FCC

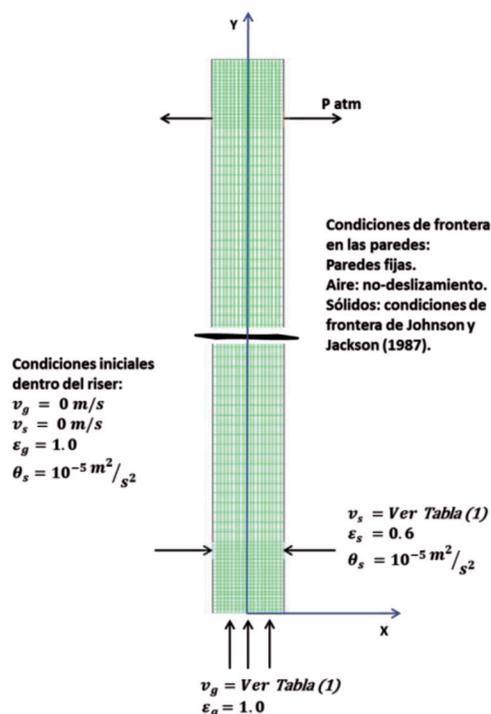


Figura 2: Dominio computacional del riser del Proceso FCC

de forma oscilatoria con una media de 0.0634 y una desviación estándar de  $8.6 \times 10^{-4}$ . En relación a la velocidad de los sólidos mostrada en la Fig. 4, se observa que el comportamiento estable se presenta aproximadamente a los 6 s de simulación, y después de ese tiempo, igualmente muestra un comportamiento oscilatorio con una media de 5.253 m/s, y una desviación estándar de 0.018. Debido a que en ambos casos se obtienen valores pequeños de la dispersión expresada por la desviación estándar se puede considerar que se ha alcanzado el estado estacionario para ambas variables, y ya que las variables se comportan diferente en su convergencia y para asegurar que se alcanza plenamente el estado estacionario en ambas variables, la simulación se deja correr hasta los 20 s, y a partir de ese punto y hasta los 40 s, se toma los promedios de las variables analizadas.

En ambos casos se observa que las variables se empiezan a incrementar después de iniciada la simulación a aproximadamente

<sup>1</sup> parametric study

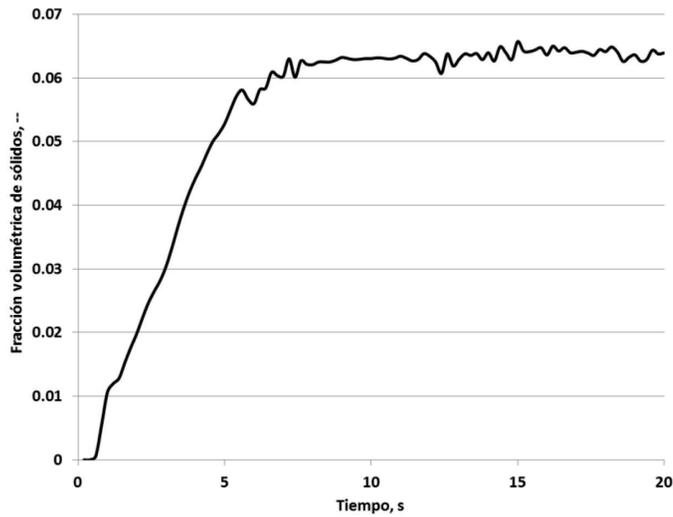


Figura 3: Convergencia de la fracción volumétrica de los sólidos

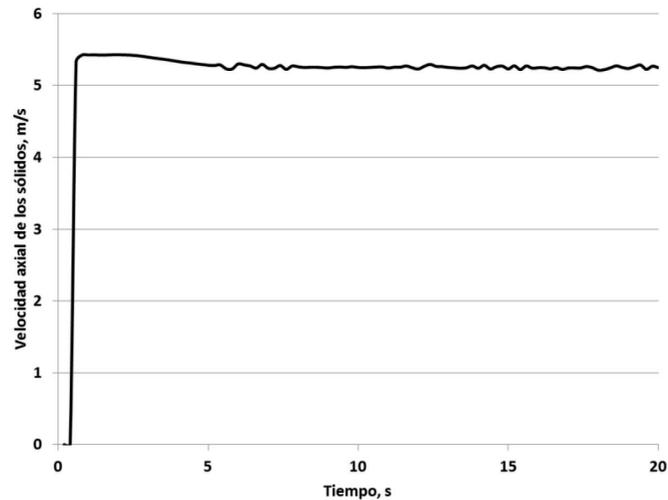


Figura 4: Convergencia de la velocidad axial de los sólidos

0.5 s que es cuando los sólidos alcanzan el punto de monitoreo; ya que antes de ese tiempo el riser no contiene sólidos, tal y como se especifica en la condición inicial del sistema.

Para todos los casos de estudio se toman como constantes el coeficiente de restitución ( $e=0.95$ ), el coeficiente de restitución en las paredes ( $e_w=0.90$ ), y el coeficiente de especularidad ( $\varphi=0.50$ ). Estos valores se definen en base a los trabajos previos de Chalerm-sinsuwan et al. [10-11, 23] y Huilin et al. [9], quienes los han utilizado para simular sistemas similares al analizado en este trabajo.

Para la convergencia de las ecuaciones de momentum, fracción volumétrica, temperatura granular, energía cinética turbulenta, y velocidad de disipación de la energía turbulenta; se utiliza el esquema Upwind de primer orden mientras que para la convergencia en el tiempo se utiliza el método implícito de segundo orden hacia adelante. En este estudio se utiliza el programa ANSYS® Fluent 12.1, en un servidor con 4 procesadores Intel i5, y 64 GB de RAM, para simular el sistema, y se requirieron aproximadamente 20 horas para completar la simulación en cada caso de estudio.

### 2.2. CONDICIONES INICIALES Y DE FRONTERA

En las entradas se definen todas las velocidades y las fracciones volumétricas para ambas fases. En las salidas se define la presión atmosférica como condición de frontera. En las paredes se define una condición de no deslizamiento para todas las velocidades,

excepto la velocidad tangencial de la fase granular para la cual se definen las condiciones de frontera según lo establecen Johnson y Jackson [24] y Hui et al [25], como se muestra en las ecuaciones (24) a (26). El subíndice W establece que la velocidad tangencial, la temperatura granular y la disipación de energía fluctuante, corresponden a los sólidos en su interacción con las paredes del riser.

$$v_{st,W} = -\frac{6\mu_s \epsilon_{s,max}}{\pi\phi_s \rho_s \epsilon_s g_0 \sqrt{3}\theta} \frac{\partial v_{st,W}}{\partial n} \quad (24)$$

$$\theta_W = -\frac{\kappa_s}{\gamma_s} \frac{\partial \theta_W}{\partial n} + \frac{\sqrt{3}\pi\phi_s \epsilon_s v_{s,slip}^2 g_0 \theta^{3/2}}{6\epsilon_{s,max} \gamma_W} \quad (25)$$

Dónde

$$\gamma_W = \frac{\sqrt{3}\pi(1 - \epsilon_W)\epsilon_s \rho_s g_0 \theta^{3/2}}{4\epsilon_{s,max}} \quad (26)$$

Como condiciones iniciales se establece que la velocidad superficial del aire es nula, que el riser está lleno sólo de aire, y la temperatura granular inicial se define como  $10^{-5}$  [m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup>] [7].

Una vez descrito el modelo numérico, establecido el dominio computacional y definidas las condiciones de frontera, a continuación se presentan los resultados y la discusión de los mismos.

## 3. RESULTADOS

### 3.1. VELOCIDADES DE LA FASE SÓLIDA

La comparación de los perfiles de velocidad de la fase sólida tomados a 3.9 m de la base del riser para cada caso, se muestran en la Fig. 5. Se puede apreciar que en cada caso la velocidad de los sólidos es más alta en el centro y menor cerca de las paredes del riser. De acuerdo a las condiciones de operación, se puede observar que el desarrollo de la velocidad depende tanto de la velocidad superficial del aire de fluidización, como del flujo másico de la mezcla aire-sólido alimentado.

Este comportamiento de la velocidad de la mezcla se puede observar más claramente en las figs. (6)-(9), donde nuevamente aparece el mismo comportamiento de la velocidad, siendo más alta en el centro y menor cerca de la paredes, a lo largo de todo el riser. También en las figuras mencionadas se puede observar que el ancho de la zona de flujo con alta velocidad varía en cada caso. Esto es causado por la diferencia en el flujo másico de sólidos alimentado en las entradas laterales inferiores del riser, ya que al variar la cantidad de sólidos presentes en ese punto, provoca que también varíe el área de flujo disponible para la mezcla aire-sólidos; a mayor concentración de sólidos menor área de flujo y como consecuencia aumenta la velocidad de la mezcla.

En la parte superior del riser, los patrones de velocidad de la mezcla también son diferentes, y son afectados por la diferente cantidad de sólidos presentes.

El estudio de independencia de malla se realiza para el caso PS1 y la comparación de los resultados obtenidos se incluyen en la Fig. 5 para la velocidad y en la Fig. 10 para la fracción volumétrica de sólidos. Ya que los resultados obtenidos para los dos mallados tienen tendencias muy cercanas se considera que el mallado con menor número de celdas previamente utilizado es adecuado para simular el sistema de este trabajo.

Para el caso PS1 (Fig. 6) de alta velocidad del gas y alto flujo másico de la mezcla aire-sólido, se presenta una zona estancada de alta concentración de sólidos en lo alto del riser inmediata-

mente arriba de las salidas. Al alcanzar la mezcla aire-sólido la parte alta del riser se encuentra con la zona de alta concentración de sólidos y no es posible que avance más arriba de la zona estancada, por tanto sale directamente del riser. La mezcla aire-sólido llega con una elevada energía cinética debido a la alta velocidad, lo cual provoca que dicha energía sobrepasa a la energía potencial asociada a la posición y a la fuerza de gravedad sobre los sólidos, impidiendo que estos fluyan hacia abajo.

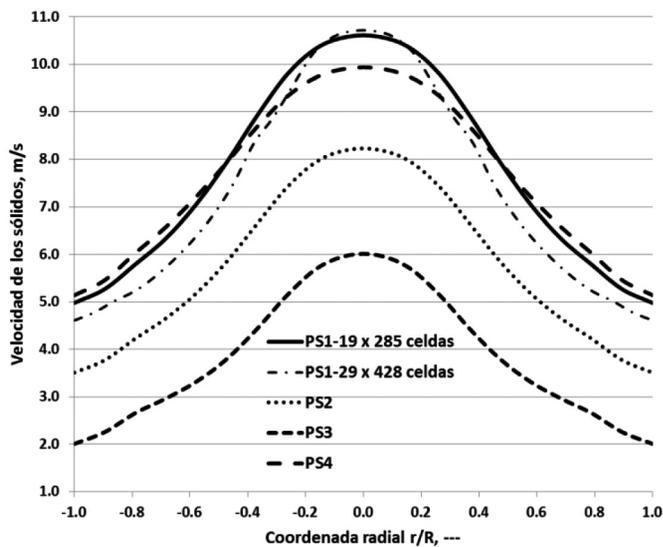


Figura 5: Perfil radial de velocidad de los sólidos, m/s

Al disminuir el flujo másico de sólidos y la velocidad superficial del gas como se muestra en la Fig. 7 para el caso PS2 se puede observar que la zona estancada permanece debido a que la energía cinética de la mezcla permanece alta, sin embargo la concentración de sólidos disminuye a un punto en que algunas partículas pueden pasar entre la zona estancada, haciendo evidente que esta zona presenta una menor concentración de sólidos que en el caso PS1.

Disminuyendo aún más el flujo másico de sólidos y la velocidad superficial del gas como en el caso PS3 (Fig. 8), se forma una distribución de sólidos más homogénea a lo largo del riser, de hecho no se presenta ninguna zona de alta concentración de sólidos, y la mezcla aire-sólido sale libremente del riser. Esto se puede explicar porque no existe una cantidad suficiente de sólidos para formar una zona de alta concentración, ni una energía cinética lo suficientemente alta para sostener dicha zona.

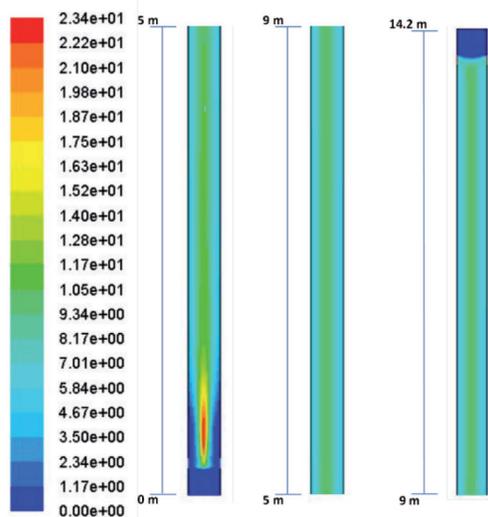


Figura 6: PS1 distribución axial de velocidad de los sólidos, m/s

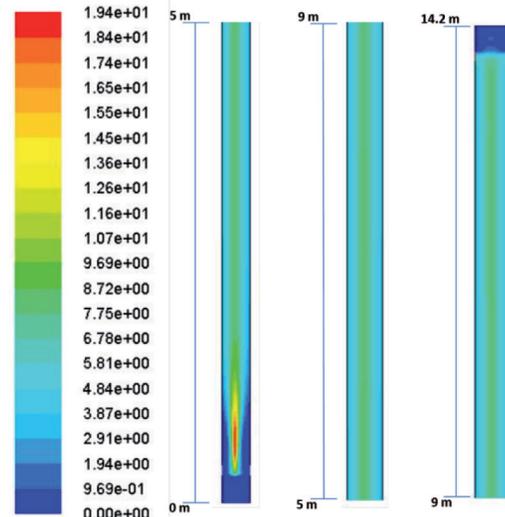


Figura 7: PS2 distribución axial de velocidad de los sólidos, m/s

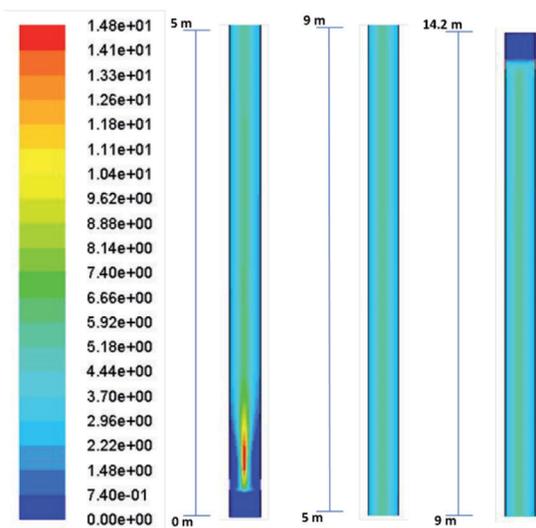


Figura 8: PS3 distribución axial de velocidad de los sólidos, m/s

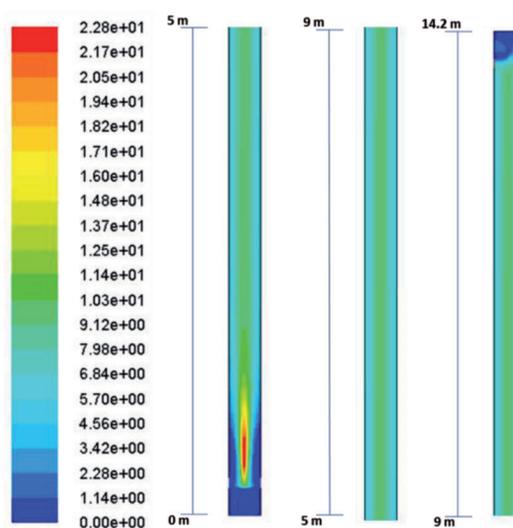


Figura 9: PS4 distribución axial de velocidad de los sólidos, m/s

El caso PS4 (Fig. 9) presenta características especiales dentro de la fluidización rápida de un lecho fluidizado, ya que tiene un bajo flujo másico de sólidos y una alta velocidad superficial del

gas, de tal forma que no hay suficiente cantidad de sólidos para formar una zona de elevada concentración en la parte superior del riser, pero la mezcla tiene mucha energía cinética debido a su velocidad, por lo que se forma una zona altamente turbulenta por encima de las salidas del riser, lo que provoca que la salida de la mezcla sea caótica.

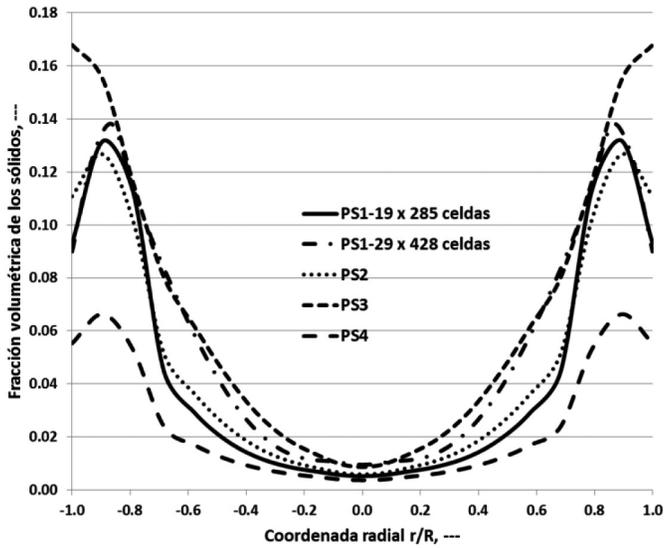


Figura 10: Perfil radial de la fracción volumétrica de los sólidos

### 3.2. FRACCIÓN VOLUMÉTRICA DE SÓLIDOS

El gráfico comparativo de las fracciones volumétricas de sólidos tomadas a 3.9 m de altura del riser para cada caso, se muestra en la Fig. 10. Se pueden observar que en cada caso se presenta el patrón de flujo típico aire-sólido núcleo-anular, con zonas concentradas y diluidas de sólidos en las direcciones axial y radial del riser. Este comportamiento se puede ver más claramente en las Figs. (11)-(14), donde de acuerdo a las condiciones de operación dichas zonas cambian en concentración y ubicación dentro del riser.

Cada caso analizado de acuerdo a las condiciones de operación especificadas en la Tabla 1, se pueden considerar como patrones de flujo de fluidización rápida. La densidad de sólidos (concentración) es alta en el fondo, y baja en la parte superior del riser; así mismo, la densidad de sólidos es baja en el centro y alta cerca de las paredes del riser. Este comportamiento del flujo núcleo-anular

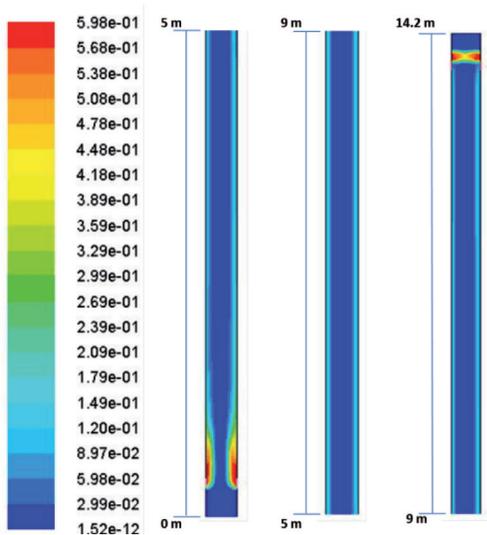


Figura 11: PS1 distribución axial de la fracción volumétrica de los sólidos

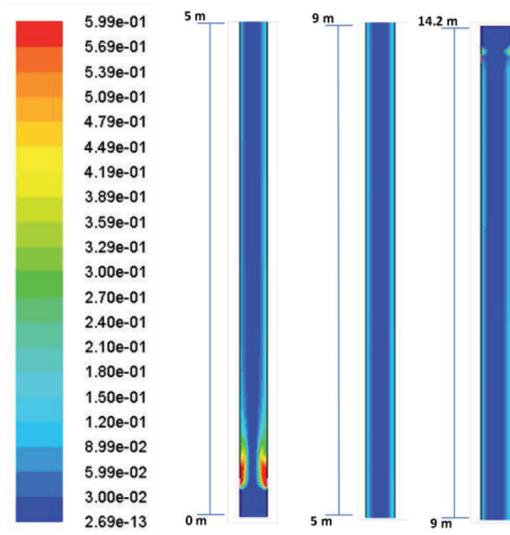


Figura 12: PS2 distribución axial de la fracción volumétrica de los sólidos

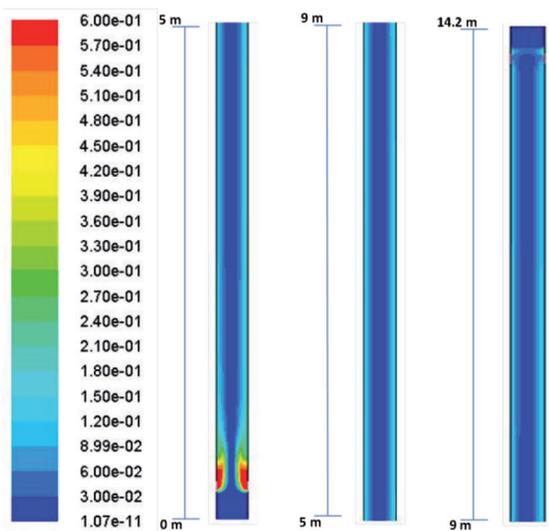


Figura 13: PS3 distribución axial de la fracción volumétrica de los sólidos

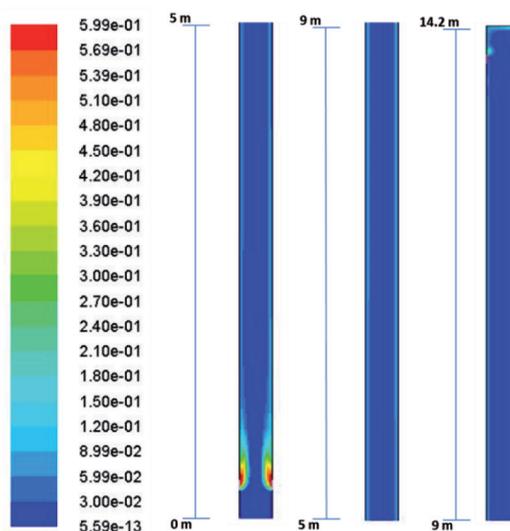


Figura 14: PS4 distribución axial de la fracción volumétrica de los sólidos

es típico de los Lechos Fluidizados Circulantes (CFB) de alta densidad de sólidos.

Como se puede ver en la Fig. 10, a 3.9 m del fondo del riser donde los resultados numéricos fueron analizados, el patrón de concentración de sólidos es proporcional a la velocidad superficial del gas, y al flujo másico de sólidos inicial. En todos los casos se puede confirmar que existe una zona muy diluida en sólidos en el centro del riser, y unas zonas más concentradas en sólidos cerca de las paredes del riser. A altas velocidades del gas y altos flujos másicos de sólidos (casos PS1 y PS2) la zona de mayor concentración de sólidos aparece en las zonas cercanas a las paredes ( $r/R = -0.9$  y  $r/R = 0.9$ ), mientras que en la zona central del riser, es menor. Y este mismo perfil se repite para los casos PS3 y PS4. Este comportamiento de la concentración de sólidos también puede ser observado en las figs. (11)-(14) donde es claro que el ancho de la zona de alta densidad de sólidos cambia continuamente a lo largo del riser, afectada por las variaciones de velocidad y los flujos másicos de sólidos iniciales.

Los perfiles de concentración de sólidos tomados a 3.9 m del fondo del riser, para los casos PS1, PS2, y PS3 tienen un comportamiento irregular para cada velocidad superficial del gas, presentando su zona de mayor concentración en la zona central del riser, y menor en las paredes del mismo. Esto es provocado por los sólidos que circulan por el centro del riser, los cuales tienen una alta energía cinética; debido a su elevada velocidad; que dejan atrás a los sólidos cerca de las paredes los cuales también pierden energía debido a la fricción contra las paredes, sin llegar a presentar velocidades negativas (descender por las paredes), debido a las condiciones de operación de los casos analizados en este trabajo, fundamentalmente a la alta velocidad superficial del gas. Y el caso PS3, que tiene baja velocidad también tiene una baja concentración de sólidos. A las condiciones analizadas no se presenta una combinación de las mismas que provoque una velocidad negativa en los sólidos cerca de las paredes.

Tanto en el fondo como en la parte superior del riser también se presentan diferencias considerables de concentración de sólidos entre los casos de estudio analizados. En la parte superior del riser en los casos PS1 y PS2, de alta velocidad superficial del gas y alto flujo másico de sólidos, se forma una zona de alta concentración de sólidos enseguida arriba de las salidas del riser, y una zona casi vacía de sólidos en la parte final superior del mismo.

Para el caso PS3 de un valor medio de flujo másico de sólidos y baja velocidad superficial del gas (Fig. 13), se presenta una zona diluida en sólidos arriba de las salidas del riser, de tal forma que algunas partículas sólidas fluyen hasta la parte más alta del riser, pero la mayoría de la mezcla se dirige hacia las salidas. Para el caso PS4 de bajo flujo másico de sólidos y alta velocidad superficial del gas, la mezcla gas-sólido circula libremente hasta la parte superior del riser formando una corriente que fluye continuamente hacia la salida del riser.

En el fondo del riser para los casos PS1 y PS2 de alto flujo másico de sólidos y alta velocidad superficial del gas, en el punto donde ambas corrientes se encuentran la mezcla aire-sólido proveniente de las entradas laterales que es impulsada por la corriente de aire que viene del fondo del riser, provocando que el área de flujo del núcleo se haga más estrecha, e induciendo a que la velocidad de la mezcla aire-sólido que fluye por el núcleo se incremente. De hecho para cada caso analizado sucede lo mismo, pero el tamaño del área de flujo disponible varía de acuerdo al flujo másico proveniente de las entradas laterales de sólidos en cada caso.

Tanto la distribución de las concentraciones de sólidos, como el patrón de velocidades de la mezcla aire-sólido confirma la apa-

rición del patrón de flujo núcleo-anular dentro del riser del lecho fluidizado circulante.

#### 4. CONCLUSIONES

Los perfiles radiales de velocidad tomados a 3.9 m desde el fondo del riser presentan una zona de alta velocidad en el centro, y zonas de menor velocidad cerca de las paredes. De acuerdo a este comportamiento se puede establecer que dichos perfiles son proporcionales a la velocidad superficial del gas.

Una velocidad superficial elevada del gas causa que la distribución radial de los sólidos sea irregular con zonas de mayor concentración en puntos localizados en la zona central del riser y una menor concentración de sólidos en las paredes. Por otra parte, una velocidad de fluidización baja provoca que la mayor concentración de sólidos esté en las paredes del riser lo cual es típico del patrón de flujo núcleo-anular.

De acuerdo a los perfiles radiales de velocidad y concentración de los sólidos obtenidos en este análisis numérico, se puede establecer que el modelo Euleriano-Euleriano en 2D, junto con la Teoría Cinética del Flujo Granular (KTGF) es capaz de reproducir satisfactoriamente las características principales del complejo flujo gas-sólido a diferentes condiciones de operación. Sin embargo, también se puede establecer que el modelo de arrastre propuesto no es capaz de predecir la formación de agrupación de partículas (clusters), y esto provoca que tampoco se reproduzca; como en trabajos anteriores de otros autores; el movimiento descendente de los sólidos cerca de las paredes.

Siendo el flujo gas-sólido un fenómeno tan complejo, existen varios parámetros que deben ser ajustados, tales como el coeficiente de restitución entre partículas ( $e$ ), el coeficiente de restitución de las partículas con las paredes ( $e_w$ ), y el coeficiente de especularidad ( $\phi$ ); así como evaluar otros modelos de arrastre que sean capaces de predecir el flujo descendente de los sólidos cerca de las paredes del riser.

#### BIBLIOGRAFÍA

- [1] Grace JR, Avidan AA, Knowlton TM. "Circulating fluidized beds". Blackie Academic and Professional, London, UK. 1997.
- [2] Chalerm-sinsuwan B, Kuchonthara P, Piumsomboon P. "CFD modelling of tapered circulating fluidized bed reactors risers: Hydrodynamic description and chemical reaction responses". Chem. Eng. Proc. 2010. Vol. 49-11 p. 1144-1160. (doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cep.2010.08.016>).
- [3] Benyahia S, Arastoopour H, Knowlton TM. "Prediction of solid and gas flow behavior in a riser using a computational multiphase flow approach". Fluidization IX. Fan, L.S., Knowlton, T.M.; Engineering Foundation. New York. 1998 p. 493-500.
- [4] Kuipers JAM, van Duin KJ, van Beckum FPH, et al. "A numerical model of gas fluidized beds". Chem. Eng. Sci. 1992. Vol. 47-8 p. 1913-1924. (doi: [http://dx.doi.org/10.1016/0009-2509\(92\)80309-Z](http://dx.doi.org/10.1016/0009-2509(92)80309-Z)).
- [5] Sun B, Gidaspow D. "Computation of circulating fluidized-bed riser flow for the Fluidization VIII benchmark test". Ind. Eng. Chem. Res. 1999, Vol. 38-3 p. 787-792 (doi: <http://dx.doi.org/10.1021/ie9803669>).
- [6] Neri A, Gidaspow D. "Riser hydrodynamics: Simulation using kinetic theory" AIChE Journal. 2000. Vol. 46-1 p. 52-66 (doi: <http://dx.doi.org/10.1002/aic.690460108>).
- [7] Benyahia S, Arastoopour H, Knowlton TM, et al. "Simulation of particles and gas flow behavior in the riser section of a circulating fluidized bed using the kinetic theory approach for the particulate phase". Powder Technol. 2000. Vol. 112-1,2 p. 24-33 (doi: [http://dx.doi.org/10.1016/S0032-5910\(99\)00302-2](http://dx.doi.org/10.1016/S0032-5910(99)00302-2)).
- [8] Benyahia S, Arastoopour H, Knowlton TM "Two-dimensional transient numerical simulation of solids and gas flow in the riser section of a circulating fluidized bed". Chem. Eng. Comm. 2002. Vol. 189-4 p. 510-527 (doi: <http://dx.doi.org/10.1080/00986440212093>).
- [9] Huilin L, Yunhua Z, Zhineng S, et al. "Numerical simulations of gas-solid

flow in tapered risers". Powder Technol. 2006. Vol. 169-2 p. 89-98 (doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.powtec.2006.07.023>).

[10] Chalermnsinsuwan B, Kuchonthara P, Gidaspow D. "Kinetic theory based computation of PSRI riser. Part I-Estimate of mass transfer coefficient". Chem. Eng. Sci. 2009. Vol. 64-6 p. 1195-1211 (doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2008.11.010>).

[11] Chalermnsinsuwan B, Kuchonthara P, Piumsomboon P. "Effect of circulating fluidized bed reactor riser geometries on chemical reaction rates by using CFD simulation". Chem. Eng. Proc. 2009. Vol. 48-1 p. 165-177 (doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ccep.2008.03.008>).

[12] Wang S, Guodong L, Huilin L, et al. "Computational fluid dynamics of riser using kinetic theory of rough spheres". Powder Technol. 2012. Vol. 228 p. 56-68 (doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.powtec.2012.04.052>).

[13] Li V, Kwauk, M. "The dynamics of fast fluidization". 1980. Springer, New Hampshire, USA. 537-544. (ISBN: 978-1-4684-1047-1).

[14] Kunni D, Levenspiel O. "Fluidization Engineering". 1991. Butterworth-Heinemann, Newton MA, USA (ISBN: 0-409-90233-0)

[15] Gidaspow D. "Multiphase flow and fluidization: Continuum and kinetic theory description". 1992. Academic Press Inc., San Diego, Cal. USA (ISBN: 0-12-282470-9).

[16] Syamlal M, O'Brien TJ "Computer simulation of bubbles in a fluidized bed". AIChE Symposium Series. 1989. Vol. 85 p. 22-31. ISBN-10: 0816904685.

[17] Syamlal M. MFIX documentation: numerical techniques. Tech. Rep. DOE/MC-31346-5824. NTIS/DE98002029. National Technical Information Service. 1998. Springfield, Va, USA.

[18] ANSYS Fluent Theory Guide. Release 14.5. Octubre 2012.

[19] Knowlton T, Geldart D, Matsen J, et al. "Comparison of CFB model, PSRI challenge problem presented at the eight international fluidization conference". 1995. Tour, France.

[20] Peirano E, Delloume V, Lecker B. "Two- or three-dimensional simulations of turbulent gas-solid flows applied to fluidization". Chem. Eng. Sci. 2001. Vol. 56 p. 4787-4799 (doi: [http://dx.doi.org/10.1016/S0009-2509\(01\)00141-5](http://dx.doi.org/10.1016/S0009-2509(01)00141-5)).

[21] Li T, Pannala S, Shahnam M. "CFD simulations of circulating fluidized bed risers, part II: evaluation of differences between 2D and 3D simulations". Powder Tech. 2014. Vol. 254 p. 115-124 (doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.powtec.2014.01.022>).

[22] Almuttahir A, Taghipour F. "Computational fluid dynamics of a circulating fluidized bed under various fluidization conditions". Chem. Eng. Sci. 2008. Vol. 63-6 p. 1696-1709 (doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2007.11.020>).

[23] Chalermnsinsuwan B, Kuchonthara P, Piumsomboon P. "CFD Modeling of tapered circulating bed reactor risers: Hydrodynamic description and chemical reaction responses". Chem. Eng. Proc. 2010. Vol. 49 p. 1144-1160 (doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ccep.2010.08.016>).

[24] Johnson PC, Jackson R. "Frictional-collisional constitutive relations for granular material, with application to plane shearing". J. Fluid Mech. 1987. Vol. 176 p. 67-93 (doi: <http://dx.doi.org/10.1017/S0022112087000570>).

[25] Hui K, Haff PK, Jackson R. "Boundary conditions for high-shear grain flows". 1984. J. Fluid Mech. Vol.145 p. 223-233 (doi: <http://dx.doi.org/10.1017/S0022112084002883>).

$g_0$	Función de distribución radial
$I$	Tensor unitario
$P$	Presión del gas, Pa
$p_s$	Presión de los sólidos, Pa
$Re_k$	Número de Reynolds
$t$	Tiempo, s
$v$	Velocidad, m/s
$v_g$	Velocidad del gas de fluidización, m/s
$v_{r,s}$	Velocidad terminal de los sólidos, m/s
$v_s$	Velocidad de los sólidos dentro del riser, m/s
$v_{s,slip}$	Velocidad de deslizamiento de las partículas en las paredes, m/s
$v_{st,w}$	Velocidad tangencial de las partículas en las paredes, m/s
$x$	Distancia radial desde el centro del riser, m
$y$	Distancia axial desde el fondo del riser, m

Símbolos griegos

$\beta_{gs}$	Coefficiente interfacial de arrastre gas-partícula, kg/m <sup>3</sup> s
$\gamma_s$	Disipación por colisiones de la energía fluctuante de los sólidos, kg/m s <sup>3</sup>
$\gamma_w$	Disipación por colisiones de la energía fluctuante de los sólidos en las paredes, kg/m s <sup>3</sup>
$\rho_s$	Densidad de los sólidos en la entrada del riser, kg/m <sup>3</sup>
$\epsilon$	Fracción volumétrica
$\epsilon_s$	Fracción volumétrica de sólidos en la entrada del riser
$\epsilon_{s,max}$	Fracción volumétrica de sólidos a máximo empaque
$\theta$	Temperatura granular, m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>
$\theta_w$	Temperatura granular en las paredes, m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>
$\kappa_s$	Conductividad de la energía fluctuante, kg/m s
$\mu$	Viscosidad, kg/m s
$\xi_s$	Viscosidad promedio de la fase sólida, kg/m s
$\rho$	Densidad, kg/m <sup>3</sup>
$\tau$	Tensor de cizalla, Pa
$\varphi$	Coefficiente de especularidad
$\phi_s$	Intercambio de energía fluctuante entre fases, kg/m s <sup>3</sup>

Subíndices

g	Fase gas
s	Fase sólida

AGRADECIMIENTOS

Se agradece el apoyo del Instituto Mexicano del Petróleo por otorgar al autor principal una beca de tiempo completo para desarrollar los estudios de doctorado bajo los cuales se realiza la investigación que motiva el presente trabajo.

NOMENCLATURA

$A_r$	Área del riser, m <sup>2</sup>
$A_l$	Área de ambas entradas laterales de sólidos al riser, m <sup>2</sup>
$C_{D0}$	Coefficiente de arrastre
$d_p$	Diámetro de las partículas, m
$e$	Coefficiente de restitución entre partículas
$e_w$	Coefficiente de restitución entre las partículas y las paredes
$G_s$	Flujo másico de sólidos dentro del riser, kg/m <sup>2</sup> s
$g$	Aceleración de la gravedad, m/s <sup>2</sup>