UNIVERSIDAD DE ORIENTE
NÚCLEO DE ANZOÁTEGUI
ESCUELA DE INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS
DEPARTAMENTO DE MECÁNICA

# "ANÁLISIS DE DISPERSIÓN DE ELEMENTOS CONTAMINANTES EMITIDOS A TRAVÉS DE LA NUEVA CHIMENEA DE LA UNIDAD DE CRAQUEO CATALÍTICO FLUIDIZADO DE LA REFINERÍA PUERTO LA CRUZ"

Realizador por:
**CARLOS EDUARDO ORTIZ MAS**

Trabajo de Grado presentado ante la Universidad de Oriente como Requisito Parcial para optar al Título de
INGENIERO MECÁNICO

Barcelona, Octubre de 2010

UNIVERSIDAD DE ORIENTE
NÚCLEO DE ANZOÁTEGUI
ESCUELA DE INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS
DEPARTAMENTO DE MECÁNICA

# "ANÁLISIS DE DISPERSIÓN DE ELEMENTOS CONTAMINANTES EMITIDOS A TRAVÉS DE LA NUEVA CHIMENEA DE LA UNIDAD DE CRAQUEO CATALÍTICO FLUIDIZADO DE LA REFINERÍA PUERTO LA CRUZ"

Prof. Orlando M. Ayala
Asesor Académico.

Ing. José Carrero
Asesor Industrial

Barcelona, Octubre de 2010

UNIVERSIDAD DE ORIENTE

NÚCLEO DE ANZOÁTEGUI

ESCUELA DE INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS

DEPARTAMENTO DE MECÁNICA

**"ANÁLISIS DE DISPERSIÓN DE ELEMENTOS CONTAMINANTES EMITIDOS A TRAVÉS DE LA NUEVA CHIMENEA DE LA UNIDAD DE CRAQUEO CATALÍTICO FLUIDIZADO DE LA REFINERÍA PUERTO LA CRUZ"**

**El jurado hace constar que asignó a esta Tesis la calificación de:**

_____

Prof. Orlando M. Ayala

Asesor Académico.

_____

Prof. Anabelis Rodríguez

Jurado principal

_____

Prof. Yordy González

Jurado principal

Barcelona, Octubre de 2010

# RESOLUCIÓN

**Articulo 41**

**Reglamento para trabajo de grado**

"Los Trabajos de Grado son de la exclusiva propiedad de la Universidad de Oriente, y sólo podrán ser utilizados para otros fines con el consentimiento del Consejo de Núcleo respectivo, quién deberá participarlo previamente al Consejo Universitario, para su autorización"

# DEDICATORIA

Les dedico este trabajo a todas aquellas personas que me ayudaron en el proceso de su elaboración en especial a mis padres y hermana quienes me apoyaron y brindaron todo su amor para que llevara a cabo esta gran meta. También a mi novia que me ayudó incondicionalmente y me animó a no decaer en el proceso, te amo.

Como también a mi fuente de inspiración divina (dios y la virgen del valle) que me dan la fortaleza para realizar todo lo que me propongo en mi vida.

# AGRADECIMIENTO

Para llevar a cabo esta meta goce del apoyo y ayuda incondicional de mis familiares como lo son: tíos (as), primos (as), hermana, mi novia Anna, mi amigo Jackson y mis padres.

En el proceso de investigación también agradezco a quienes fueron mis tutores académico e industrial, que me guiaron a lo largo del trabajo y de quienes aprendí muchas cosas que serán útiles a lo largo de mi vida laboral.

A todos muchas gracias.

# RESUMEN

En el presente trabajo de investigación se realizó un análisis de dispersión de elementos contaminantes emitidos a través de la nueva chimenea de la unidad de craqueo catalítico fluidizado de la refinería Puerto La Cruz, empleando técnicas de dinámica de fluido computacional (CFD). Para este estudio se tomaron en cuenta dos casos en particular, refiriéndose al caso actual, la expulsión de los gases de combustión directamente del regenerador D-1 con una altura de 64 m y un diámetro de 1,426 m y para el caso propuesto, la expulsión de los gases de combustión es a través de la nueva chimenea con 24,68 m de altura y un diámetro de 1,826 m. Se discretizó el dominio de cálculo empleando la técnica de mallado no estructurado, para cada caso. Posteriormente se describieron las ecuaciones que rigen el comportamiento del flujo en estado estacionario y se empleo el modelo de turbulencia k-ε. En las simulaciones estudiadas se efectuó una comparación cualitativa entre cada uno de los casos, donde se empleó un gas como fluido continuo con concentraciones de CO, $CO_2$ y $SO_2$ conocidos y partículas sólidas (finos de catalizador) con diámetros de 1 a 6 micrones, considerando la rosa del viento. Se analizó el comportamiento de la pluma de los gases variando la velocidad y dirección del viento. Por medio de perfiles de concentración y temperatura se analizaron las comparaciones en cuanto a la dispersión de estos parámetros y se estudio el comportamiento de las partículas y el efecto de arrastre sobre las instalaciones existentes en el área de estudio. De igual manera como producto de los análisis de los resultados se obtuvo una gran diferencia entre cada uno de los casos, en cuanto a los parámetros que se estudiaron, desfavoreciendo el caso propuesto, en el que los gases de combustión alcanzaron una altura por debajo de los 30 m, inclusive a nivel de losa.

# CONTENIDO

Pág.

RESOLUCIÓN ..... IV

DEDICATORIA ..... V

AGRADECIMIENTO ..... VI

RESUMEN ..... VII

CONTENIDO ..... VIII

ÍNDICE DE FIGURAS ..... XII

ÍNDICE DE TABLAS ..... XIV

NOMENCLATURA ..... XV

CAPÍTULO I ..... 18

INTRODUCCIÓN ..... 18

1.1. Petróleos de Venezuela Sociedad Anónima ..... 18

1.2. Ubicación y descripción del área de estudio ..... 19

1.3. Organización de la empresa ..... 20

1.4. Planteamiento del problema ..... 21

1.5. Objetivos de la investigación ..... 23

1.5.1. Objetivo general ..... 23

1.5.2. Objetivos específicos ..... 23

CAPÍTULO II ..... 24

MARCO TEÓRICO ..... 24

2.1. Antecedente de la investigación ..... 24

2.2. Fundamentos teóricos ..... 25

Pág.

2.2.1. Craqueo catalítico fluidizado ..... 25

2.2.2. Descripción del proceso de recuperación de finos aplicado en RPLC..... 28

2.2.3. Contaminación del aire ..... 29

2.2.4. Características de las principales sustancias contaminantes emitidas..... 30

2.2.4.1. Dióxido de azufre ($SO_2$)..... 30

2.2.4.2. Monóxido de carbono (CO) ..... 31

2.2.4.3. Dióxido de Carbono ($CO_2$) ..... 31

2.2.4.4. Material particulado (MP)..... 32

2.2.5. Dispersión atmosférica de contaminantes en el aire ..... 32

2.2.6. Modelos de dispersión..... 34

2.2.7. Tipos de modelos de dispersión ..... 35

2.2.7.1. Modelo gaussiano ..... 36

2.2.7.2. Modelos estadísticos o empíricos ..... 37

2.2.7.3. Modelos físicos ..... 37

2.2.7.4. Modelos numéricos ..... 38

2.2.8. Principios básicos de la mecánica de los fluidos ..... 38

2.2.9. Ecuaciones de gobierno..... 39

2.2.10. Dinámica de fluidos computacional..... 41

2.2.10.1. Metodología del CFD..... 42

2.2.11. Discretización de las ecuaciones del flujo ..... 45

2.2.11.1. Método de los volúmenes finitos ..... 45

2.2.11.2. Discretización del dominio ..... 47

Pág.

2.2.12. Modelado de transporte de partículas ..... 50
2.2.13. Fundamento para el modelado del flujo turbulento ..... 51
2.2.13.1. Modelos que promedian temporalmente las ecuaciones de Navier-Stokes (RANS) ..... 52
2.2.14. Número de Stokes ..... 54
2.2.15. Criterio de convergencia ..... 55
CAPÍTULO III ..... 57
MARCO METODOLÓGICO ..... 57
3.1. Geometría/mallado ..... 58
3.1.1. Geometría ..... 58
3.1.2. Mallado ..... 60
3.1.2.1. Construcción del mallado ..... 60
3.1.2.2. Sensibilizado del mallado ..... 65
3.2. Definición física ..... 67
3.2.1. Condiciones operacionales ..... 67
3.2.2. Condiciones del ambiente ..... 68
3.2.2.1. Comportamiento del viento ..... 68
3.2.2.2. Variación de la velocidad del viento con la altura ..... 68
3.2.3. Elementos contaminantes ..... 70
3.3. Descripción del modelo final ..... 71
3.3.1. Condiciones de frontera. ..... 73
3.3.1.1. Entrada (Inlet) ..... 73

Pág.

3.3.1.2. Salida (outlet) ..... 77

3.3.1.3. Pared (wall) ..... 77

3.3. Criterio de Convergencia ..... 78

CAPÍTULO IV ..... 79

RESULTADOS Y ANÁLISIS ..... 79

4.1. Análisis de sensibilidad del mallado ..... 79

4.2. Longitud de entrada de la chimenea ..... 87

4.3. Selección del rango para el cálculo de flujos externos ..... 89

4.4. Influencia de las partículas sobre el fluido ..... 90

4.5. Análisis de dispersión ..... 91

4.5.1. Comportamiento de los gases expulsados a la atmosfera ..... 91

4.5.2. Dispersión de concentración de los componentes CO, $CO_2$ y $SO_2$ ..... 100

4.5.3. Distribución de la temperatura en la pluma de los gases de combustión ..... 106

4.5.4. Efecto del arrastre de finos de catalizador sobre las instalaciones existentes ..... 109

CAPÍTULO V ..... 111

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES ..... 111

RECOMENDACIONES ..... 113

BIBLIOGRAFÍA ..... 114

APÉNDICE ..... 117

Apéndice A ..... 117

# ÍNDICE DE FIGURAS

Pág.

Figura 3.1 Desarrollo sistemático de la investigación. .....57
Figura 4.1 Perfil de concentración de $CO_2$ en la línea 1. .....79
Figura 4.2 Perfil de concentración de $CO_2$ en la línea 2. .....80
Figura 4.3 Perfil de concentración de $CO_2$ en la línea 3. .....80
Figura 4.4 a) Línea de estudio para el caso actual., b) Línea de estudio para el caso propuesto. .....83
Figura 4.5 Curvas de velocidad para el caso actual. .....84
Figura 4.6 Curvas de velocidad para el caso propuesto. .....84
Figura 4.7 Porcentaje de error para el caso actual. .....86
Figura 4.8 Porcentaje de error para el caso propuesto. .....86
Figura 4.9 Perfil de velocidad para el caso actual. .....87
Figura 4.10 Perfil de velocidad para el caso propuesto. .....88
Figura 4.11 Perfil de velocidad para ambas condiciones. .....90
Figura 4.12 Comportamiento de la pluma de los gases de combustión para el caso actual .....93
Figura 4.13 Comportamiento de la pluma de los gases de combustión para el caso propuesto .....95
Figura 4.14 Elevación de la pluma H que representa la altura efectiva de la chimenea y corte de la pluma donde se observa las altas concentraciones de elementos contaminantes en el centro de la misma. .....98
Figura 4.15 Vectores de velocidad. .....99
Figura 4.16 Viscosidad de torbellino. .....99
Figura 4.17 Perfil de concentración de CO en función de los meses del año. .....101
Figura 4.18 Perfil de concentración de $CO_2$ en función de los meses del año. .....101

| | |
|---|---|
| $Z_0$ | Tamaño de los remolinos producidos por la rugosidad del terreno |
| ˚C | Grados centígrados |
| $\delta$ | Matriz identidad |
| □ | Disipación de la turbulencia |
| $\lambda$ | Conductividad térmica |
| $\mu$ | Viscosidad dinámica del fluido |
| $\rho$ | Densidad del fluido |
| $\tau$ | Tensor de esfuerzo cortante |
| $\vartheta$ | Volumen de cada celda |
| $\Delta h$ | Elevación de la pluma (sobre la chimenea) |

# CAPÍTULO I

# INTRODUCCIÓN

## 1.1. Petróleos de Venezuela Sociedad Anónima

Es la corporación estatal de la República Bolivariana de Venezuela que se encarga de la exploración, producción, manufactura, transporte y mercadeo de los hidrocarburos, comprometida con la protección ambiental; con el fin último de motorizar el desarrollo armónico del país, afianzar el uso soberano de los recursos y potenciar el desarrollo endógeno. En ese sentido, Pdvsa, está subordinada al Estado Venezolano y por lo tanto actúa bajo los lineamientos trazados en los planes de desarrollo nacional y de acuerdo a las políticas, directrices, planes y estrategias para el sector de los hidrocarburos, dictadas por el Ministerio de Energía y Petróleo.

La Corporación estatal, creada en el año 1975, por la Ley de Reserva al Estado la industria y el comercio de los Hidrocarburos, cuenta con trabajadores comprometidos con la defensa de la soberanía energética y el deber de agregar el mayor valor posible al recurso petrolero, guiados por los principios de unidad de comando, trabajo en equipo, colaboración espontánea y uso eficiente de los recursos. Todo lo expuesto se encuentra expresado en la Constitución de la República Bolivariana de Venezuela, del cual toda la totalidad de sus acciones pertenecen al Estado Venezolano, en razón de la estrategia nacional y la soberanía económica y política, ejercida por el pueblo venezolano.

En el último trimestre del referido año, la producción petrolera promedió 3,3 millones de barriles diarios de hidrocarburos, incluidos crudos extrapesados y líquidos de gas.

De estas cifras, cerca de dos millones de barriles diarios (MMBD) se refinan en occidente, un millón 257 barriles en oriente y 89 mil BD corresponden al eje Barinas-Apure. Todo lo anterior ha permitido que Petróleos de Venezuela haya recuperado su solvencia financiera y logrado facturar más de 12 mil millones de dólares, hasta principios del cuarto trimestre de 2003.

En el oriente venezolano se han producido dos éxitos exploratorios, con el descubrimiento de los pozos Chaguaramal 6X y Tácata 2X, que reportan en conjunto 236 millones de barriles de crudos livianos y medianos, así como tres mil millones de pies cúbicos de gas, dos mil de los cuales son no asociados. Además, existe el proyecto para iniciar un amplio desarrollo costa afuera, en aguas territoriales venezolanas, dentro de un área de aproximadamente de 500.000 kilómetros cuadrados.

Por esta razón, Pdvsa está enfocando sus políticas y estrategias de acción hacia las tecnologías aplicadas a los hidrocarburos de tipo pesado y extra pesado, para mejorar su calidad de cara a la creciente demanda energética en el ámbito mundial.

## 1.2. Ubicación y descripción del área de estudio

Las oficinas principales de Pdvsa están ubicadas en la Avenida Libertador, Edificio Petróleos de Venezuela, Torre Este, La Campiña, Caracas 1050-A Venezuela. Sin embargo su centro principal de procesamiento de crudo y el considerado más importante se encuentra geográficamente ubicado en la costa nororiental del país al este de la ciudad de Puerto La Cruz en el estado Anzoátegui; tiene facilidades de acceso desde el Mar Caribe y está conectada por oleoductos con los campos de producción de Oriente.

La Refinería Puerto La Cruz, es uno de los centros de procesamientos de crudo más importantes de Pdvsa, abarca las plantas ubicadas en el centro de Puerto La Cruz, El Chaure y San Roque que integra un circuito de manufactura del petróleo extraído en los campos de los estados Monagas y Anzoátegui. Sus operaciones estratégicas cumplen tres roles principales:

- Suplir la demanda del mercado interno de la región sur-oriental del país.
- Colocación de los productos excedentes en el mercado de exportación.
- Manejo y distribución de la producción de crudos del oriente del país.

La capacidad de procesamiento de crudos es de 200 mil barriles por día, de los cuales se obtienen 73 mil barriles de gasolina y nafta, 12 mil barriles de kerosene-jet, 43 mil barriles de gasoil y 73 mil barriles de residual, insumos requeridos para la mezcla de combustibles comercializados en los mercados interno y de exportación. El manejo de los volúmenes de producción requieren de una capacidad de almacenamiento de 13,5 millones de barriles de crudo y productos, que son despachados a otras partes del país y al extranjero por la Terminal Marino de Guaraguao, el cual admite en sus siete muelles un promedio de 55 buques mensuales, que pueden transportar 20,2 millones de barriles mensuales.

### 1.3. Organización de la empresa

La Estructura organizativa permite definir en forma explícita la línea de autoridad y comunicación entre todo el personal que labora en la refinería. A continuación se muestra en la Figura 1.1, detalle organizativo de las Gerencias Operacionales de la empresa.

Este trabajo ha sido desarrollado en la Superintendencia de Proyectos Operacionales, perteneciente a la Gerencia Técnica de la Refinería Puerto La Cruz.

### 1.4. Planteamiento del problema

PDVSA, comprometida con la protección ambiental, ha impulsado una serie de proyectos con el fin de dar cumplimiento al decreto N° 638 de la Ley Penal del Ambiente: "**Normas sobre calidad de aire y control de la contaminación atmosférica" [1]** dirigidos al mejoramiento de la calidad del aire y la prevención y control de la contaminación atmosférica producida por fuentes capaces de generar emisiones de elementos contaminantes. En virtud de lo anterior, la Refinería Puerto La Cruz actualmente impulsa un proyecto denominado **"Reducción de Emisión de Catalizadores en la unidad de Craqueo Catalítico Fluidizado - (RECA)"**, con el cual se logrará reducir la emisiones de catalizador hasta un valor por debajo de 50 $mg/Nm^3$, cumpliendo así lo estipulado en la normativa legal vigente que rige esta materia.

Para esto un nuevo sistema será instalado en el complejo de conversión media de la Refinería, específicamente en la unidad de Craqueo Catalítico Fluidizado, contemplando la instalación de dos (2) nuevas unidades de separación: el Separador de Tercera Etapa (STE) y el Separador de Cuarta Etapa (SCE), ubicados aguas abajo del Regenerador D-1 de modo que los gases de combustión generados en la etapa de regeneración son conducidos desde el D-1 hacía el STE donde se produce una separación mecánica con la ayuda de 54 elementos ciclónicos. De este equipo se derivan dos corrientes, una de ellas prácticamente libre de finos de catalizador, mientras que la segunda es denominada corriente de fondo la cual maneja aproximadamente el 97 % de los finos de catalizador conduciéndolos hacia el SCE donde a través de 54 elementos filtrantes se captura el 99 % de los finos de catalizador suspendidos en la corriente de fondo. El gas limpio producto de este

segundo proceso de separación se combina con la corriente de tope del STE aguas abajo del sistema para posteriormente ser expulsados a través de la nueva chimenea del sistema. [2]

La nueva chimenea posee una altura aproximada de 24,68 m y un diámetro de 1,826 m, medidos desde el nivel de losa, a diferencia de la chimenea existente que expulsa los gases de combustión a una altura de 56,5 m y un diámetro de 1,426 m, esta diferencia genera cierta incertidumbre en cuanto a la operación del nuevo sistema ya que se desconoce la dispersión de los gases y finos de catalizador que componen el gas de combustión expulsados por la nueva chimenea en su nueva ubicación y altura.

En tal sentido el presente trabajo pretende realizar un estudio de dispersión de elementos contaminantes expulsados por la nueva chimenea y compararlos con la dispersión de elementos contaminantes de la instalación existente, además evaluar el impacto de la nueva chimenea en zonas adyacentes.

El estudio se fundamenta en la mecánica de fluido computacional, abordando las ecuaciones de Navier–Stokes en régimen estacionario con el propósito de obtener la solución instantánea del campo de flujo, considerando la turbulencia a través del modelo k-ε. Para cada componente contaminante gaseoso, así como también para la temperatura se resolverá una ecuación de convección – difusión para determinar su respuesta en el tiempo, mientras que para el particulado se resolverá una correlación algebraica con el fin de simular el arrastre de las partículas considerando un modelo desacoplado.

## 1.5. Objetivos de la investigación

### 1.5.1. Objetivo general

Analizar la dispersión de elementos contaminantes expulsados a través de la nueva chimenea del proyecto de Reducción de Emisiones de Catalizador en UFCC, que desarrolla PDVSA en la Refinería Puerto La Cruz, Estado Anzoátegui.

### 1.5.2. Objetivos específicos

- Estudiar las bases que fundamentan el proceso de recuperación de finos de catalizador en la unidad de craqueo catalítico fluidizado de la RPLC.

- Determinar la dispersión de concentración de los componentes CO, $CO_2$ y $SO_x$, considerando la rosa del viento, bajo la configuración existente del proceso de regeneración, utilizando una técnica de CFD.

- Determinar la dispersión de concentración de los componentes CO, $CO_2$ y $SO_x$, en función a la rosa del viento, bajo la nueva configuración del sistema de red de emisiones de catalizador de FCC, utilizando una técnica de CFD.

- Determinar la distribución de temperatura de la pluma de gases de combustión comparando el sistema actual y el futuro, utilizando una técnica de CFD.

- Analizar el efecto del arrastre de finos de catalizador sobre las instalaciones existentes, bajo la nueva configuración del sistema, utilizando una técnica de CFD.

# CAPÍTULO II

# MARCO TEÓRICO

## 2.1. Antecedente de la investigación

- En abril de 2009, CORCEGA, F. el objetivo principal de la investigación fue analizar la dispersión a cada una de las corrientes de tope de los rehervidores de dos sistemas de deshidratación del gas con trietilenglicol, de la planta turbocompresora de San Joaquín, donde se determinó que el Benceno, compuesto cancerígeno, es el contaminante de mayor alcance. Este estudio se realizó por medio de un programa comercial (Canary by Quest) que basados en modelos estadísticos que predice el comportamiento del fluido. Los resultados del estudio determinaron teóricamente que las emisiones de componentes orgánicos volátiles (COV) excedieron los límites establecidos por el decreto venezolano 638 y la Clean Air Act de EEUU [3].

Las conclusiones presentadas por el autor permitieron la comparación del comportamiento de los gases expulsados al ambiente, así validada determinaron teóricamente que las emisiones de componentes orgánicos volátiles (COV) excedieron los límites establecidos, aunque el estudio realizado estuvo basado en otro programa se lograron establecer a partir de él, parámetros relacionados al comportamiento de los gases de combustión.

- En el año 2006, CLAVIER, M. presentó una investigación donde se estudió el comportamiento fluidodinámico del aire a través de un sistema de generación eólico usando el método de volúmenes finitos. En el trabajo de investigación se desarrolló un modelo numérico tridimensional, usando la técnica de mallado no estructurado, mediante el código comercial ANSYS CFX 10.0. En el análisis de los resultados las

simulaciones fueron realizadas con tres tipos de geometría diferentes donde se tomó como parámetro variable el ángulo de paso β de los álabes de la turbina eólica, se ejecutaron en estado estacionario y se utilizó el modelo de turbulencia k-ε. Su resultado arrojó los coeficientes de potencia y se construyeron las curvas características que posteriormente fueron comparadas con las curvas teóricas [4].

Por usar el mismo programa de dinámica de fluido computacional esta investigación aporto gran información, en lo referente al uso e implementación de técnicas para ejecutar de forma efectiva las simulaciones que se ejecutaron en este trabajo.

## 2.2. Fundamentos teóricos

### 2.2.1. Craqueo catalítico fluidizado

El Craqueo: Objetivo de las refinerías, actualmente es la obtención de fracciones ligeras ya que son las más cotizadas que se obtienen del crudo. Para ello se ha pasado de un craqueo simple a un craqueo térmico más complejo que el anterior. De este modo se obtienen mayores cantidades de fracciones ligeras. El Craqueo térmico: Consiste en la ruptura de las cadenas carbonadas y acción de calor a una temperatura de entre 400 – 650 ºC. De esta ruptura se obtienen parafinas cortas, olefinas, naftalenos o aromáticos [5].

El Craqueo catalítico: Hoy en día se han introducido mejoras en el craqueo térmico mediante el empleo de catalizadores. Un proceso de craqueo catalítico integral opera con su reactor y regenerador en un único recipiente, permite la transferencia térmica directa entre los vapores de hidrocarburos que hay en el interior del reactor y el aire del regenerador, esta transferencia térmica directa ayuda que el reactor pueda funcionar a temperatura muy superior y, al mismo tiempo, reduce también la

temperatura del regenerador. La menor temperatura del regenerador reduce la desactivación del catalizador debida a los metales, y permite el proceso más económico de los residuos muy pesados que no pueden procesarse en los craqueadores convencionales de residuos.

La mayor flexibilidad del proceso integral de craqueo catalítico se deriva de la combinación sinergística de reacción de regeneración exotérmica y reacción de craqueo endotérmico integralmente, controlándose el equilibrio térmico de la unidad de la manera más eficiente. Al contrario de las unidades convencionales de FCC, se prefiere que la hidrodinámica de las diversas subsecciones del proceso de craqueo integral, concretamente tubería de subida, regenerador y depurador de catalizador, se encuentren en el régimen de fluidificación rápida, para un funcionamiento optimo de los diferentes y delicados equilibrios de la unidad. Originalmente el craqueo se realizaba térmicamente, pero los procesos catalíticos han reemplazado casi completamente al craqueo térmico, debido a que se produce más gasolina con un mayor octanaje y menos aceites pesados y gases no saturados. [6]

En contacto con el catalizador adecuado, los hidrocarburos pesados en fase vapor se dividen en elementos de menor peso molecular. El *cracking* catalítico es un proceso viejo, pero que se encuentra todavía sometido a presiones para introducir cambios y mejoras. Los catalizadores utilizados han sido mejorados aumentando su actividad mediante procesos de fabricación que producen una desaluminación, con el consiguiente aumento de la relación Si/Al. El conocimiento más profundo de la estructura del catalizador en sus componentes fundamentales permite interpretar y dirigir el proceso hacia los productos deseados.

Son muchos los factores para la industria desarrollar el proceso de craqueo con éxito, el modo en que se suministra la gran cantidad de calor necesaria para la reacción endotérmica y la manera de regenerar las partículas catalizadoras con rapidez y

efectividad. El método de craqueo catalítico fluido (FCC, del inglés fluid catalytic cracking) lleva a cabo los puntos anteriores con sencillez, de modo que realiza simultáneamente la regeneración de las partículas catalizadoras y del calor de reacción. Por ello, el proceso FCC es el de aplicación más extensa en el craqueo de hidrocarburos. [7]

El Craqueo Catalítico Fluidizado (FCC) ha sido una parte integral de las refinerías de petróleo desde 1942, cuando fue introducida en los Estados Unidos por Exxon Corporation, en respuesta a una necesidad creciente de la guerra de hidrocarburos combustibles. Una unidad de Craqueo Catalítico Fluidizado (FCCU) acepta cadenas de hidrocarburos y las divide en otros más pequeños en un proceso químico llamado cracking o agrietamiento. Esto permite a las refinerías utilizar sus recursos de petróleo crudo más eficientemente, haciendo más productos, como la gasolina, para los que existe una gran demanda. [8]

El petróleo crudo contiene una gran variedad de hidrocarburos de varias longitudes. Dependiendo de la longitud de los hidrocarburos, se pueden utilizar de varias maneras. Por ejemplo, el gas de cocina por lo general tiene cuatro átomos de carbono, mientras que la gasolina para los vehículos es una cadena más larga, con ocho átomos de carbono. Los aceites lubricantes son incluso más largas, con 36 átomos de carbono en la cadena de hidrocarburos. Cuando el aceite es refinado, estos hidrocarburos se separan para su uso.

Sin embargo, el barril de petróleo crudo no siempre dará la proporción deseada de los hidrocarburos. Por ejemplo, el mercado de la gasolina tiene más demanda en comparación con el aceite lubricante. En vez de desechar el aceite lubricante, es químicamente agrietado en un FCCU de manera que pueda convertirse en la gasolina y otros hidrocarburos más cortos.

La FCCU emplea un catalizador en forma de partículas muy finas que se comporta como un fluido cuando se airean con vapor. El catalizador fluidizado circula continuamente entre la zona de reacción y la zona de regeneración y actúa como vehículo para transferir calor desde el regenerador a la alimentación y al reactor [9].

La zeolita, la bauxita, el sílice-alúmina y el aluminio hidrosilicato son los catalizadores utilizados en FCCU Tanto el aceite, como el catalizador en la unidad de FCCU suelen ser extremadamente caliente y el aceite es a menudo en forma de vapor. El catalizador divide las cadenas largas de hidrocarburo en unidades más cortas, y la mezcla viaja desde el FCCU a otra columna de destilación de modo que los hidrocarburos agrietados se pueden extraer.

### 2.2.2. Descripción del proceso de recuperación de finos aplicado en RPLC

En la unidad de Craqueo Catalítico Fluidizado, el coque, depositado en el catalizador por las reacciones, es removido en el regenerador a través de una quema controlada del mismo.

Los gases de combustión junto a los finos de catalizador procedentes del proceso de regeneración pasarán por diferentes métodos de separación en diversos equipos. En primera instancia en el Regenerador D-1 existen cuatro ciclones primarios y cuatro ciclones secundarios, estos ciclones independientes centrifugarán los gases para retirarles una porción de finos de catalizador, para luego ser conducidos al Separador de Tercera Etapa (STE).

En el STE también ocurre un proceso de separación mecánica mediante el centrifugado de los gases, que sucede a su paso a través de 54 elementos ciclónicos, con lo que se divide en dos corrientes principales. La corriente superior o de tope

conformada por el 97,5 % de los gases de combustión y el 9 % de los finos de catalizador, es conducida hacia la atmósfera a través de la chimenea. [2]

La corriente inferior o de fondo es conducida hacia el Separador de Cuarta Etapa (SCE), esta corriente contiene aproximadamente el 91 % del total de sólidos que salen del regenerador que son arrastrados por el 2,5 % de la corriente de gas de combustión.

El SCE está provisto de un sistema avanzado de filtros que retienen cerca del 99 % de las partículas sólidas que viajan con los gases de combustión, acumulándolas en una tolva ubicada en su fondo para su posterior disposición a través de camiones, o mediante un sistema de descarga alternativo hacia la tolva de catalizador gastado F-1, existente en planta. [2]

Como resultado del proceso de ambos equipos (STE y SCE), se formará una corriente única que ingresará a la chimenea, cumpliendo con el valor máximo de 50 $mg/Nm^3$, establecido por el decreto de 638 de la Ley Penal del Ambiente actualmente en vigencia, como se muestra en la Figura 2.1.

### 2.2.3. Contaminación del aire

El aire que respiramos está compuesto por 78 % de nitrógeno, 21 % de oxígeno, 0,093% de argón y una porción de vapor de aire, cuando hablamos de contaminación del aire, nos referimos a la alteración de esta composición, producida por causas naturales o provocadas por el hombre, las primeras no se pueden evitar, pero las segundas, es nuestra obligación evitarlas.

Las fuentes que provocan la contaminación del aire se clasifican en fijas que son toda instalación establecida en un sólo lugar que tenga como finalidad desarrollar

operaciones y procesos industriales, comerciales y fuentes móviles, que son todo equipo o maquinaria no fijos, con motores de combustión y similares que con motivo de su operación generan emisiones contaminantes a la atmósfera.

La contaminación del aire es la que se produce como consecuencia de la emisión de sustancias tóxicas. Puede causar trastornos tales como ardor en los ojos y en la nariz, irritación y picazón de la garganta y problemas respiratorios. Bajo determinadas circunstancias, algunas substancias químicas que se hallan en el aire contaminado pueden producir cáncer, malformaciones congénitas, daños cerebrales y trastornos del sistema nervioso, así como lesiones pulmonares y de las vías respiratorias. A determinado nivel de concentración y después de cierto tiempo de exposición, ciertos contaminantes del aire son sumamente peligrosos y pueden causar serios trastornos e incluso la muerte [10].

La polución del aire también provoca daños en el medio ambiente, habiendo afectado la flora arbórea, la fauna y los lagos. La contaminación también ha reducido el espesor de la capa de ozono.

### 2.2.4. Características de las principales sustancias contaminantes emitidas

#### 2.2.4.1. Dióxido de azufre ($SO_2$)

El $SO_2$ es un gas incoloro e inodoro en concentraciones bajas y de olor acre en concentraciones altas. Es producido por la combustión de combustibles fósiles que contienen azufre como el carbón y el petróleo y por varios procesos industriales. Cuando el $SO_2$ y los oxidantes fotoquímicos reaccionan en la atmósfera, se forma el trióxido de azufre, el cual se combina con agua para formar ácido sulfúrico y partículas sulfatadas. Esto contribuye a la producción de lluvia ácida y al aumento de los niveles de material particulado en el aire.

La exposición al $SO_2$ puede disminuir la función pulmonar, agravar enfermedades respiratorias preexistentes (especialmente bronquitis) y reducir la habilidad de los pulmones para liberar partículas extrañas. También puede contribuir al incremento de la mortalidad, especialmente si las concentraciones de MP (material particulado) también son elevadas. Los asmáticos y las personas con enfermedades pulmonares obstructivas crónicas (EPOC) y con problemas cardíacos son los más sensibles a los efectos del $SO_2$. [10]

### 2.2.4.2. Monóxido de carbono (CO)

Un gas que no es solamente invisible sino que no tiene olor ni sabor y altanamente tóxico. El gas CO se genera como producto de desecho en la combustión incompleta del carbón, madera, aceite y otros combustibles productos del petróleo.

El monóxido de carbono hace que se desplace el oxígeno en la sangre, sofocando parcialmente de esa manera al corazón, al cerebro y a otros órganos vitales.

El camino que sigue el monóxido de carbono dentro del cuerpo es a través del pulmón. En la corriente sanguínea, se combina con la hemoglobina, que es la proteína de la sangre que hace circular el oxígeno, con una fuerza 220 veces mayor que el oxígeno. Cuando se ven privados del oxígeno, los órganos vitales dejan de funcionar como deben. El corazón trabaja intensamente y quienes sufren de enfermedades al corazón pueden experimentar dolores al pecho. La habilidad para hacer ejercicio disminuye.

### 2.2.4.3. Dióxido de Carbono ($CO_2$)

El dióxido de Carbono o gas carbónico, existe en todas partes en estado natural, es un compuesto de carbono y oxígeno que en condiciones normales está en

estado gaseoso, este gas es incoloro, inodoro y ligeramente ácido. No es inflamable ni tóxico para el hombre y es un 53 % más pesado que el aire. La combustión también produce altos niveles de dióxido de carbono, como por ejemplo las chimeneas de las fábricas que queman carbón y producen altos niveles de dióxido de carbono.

El dióxido de carbono participa en el equilibrio climático del planeta pues todas las actividades humanas lo generan y se acumula en la atmosfera donde los excesos generan el peligroso efecto del recalentamiento global. [11]

#### 2.2.4.4. Material particulado (MP)

El material particulado varía en tamaño y en composición dependiendo en gran parte de su origen. Las partículas más grandes son usualmente el polvo o la arena que el viento sopla. Las partículas más finas, referidas frecuentemente como PM10 o como PM2,5 porque son más pequeñas que 10 ó 2,5 micrones (la millonésima parte de un metro), respectivamente, se derivan principalmente de la combustión del carbón de piedra, petróleo, gasolina y combustibles de diesel. [11]
Las partículas están también relacionadas con una amplia gama de enfermedades. Así como los niveles de las partículas aumentan, también aumenta la incidencia de narices destilantes o de obstrucción nasal, sinusitis, irritación en la garganta, tos floja, resfríos cefálicos, fiebre del heno, ardor en los ojos u ojos rojizos, respiración sibilante, tos seca, flema, respiración jadeante, y malestar o dolor del pecho, así como aumentan los ingresos al hospital por causa del asma y de la bronquitis. Lo mismo con tos crónica, asma y enfisema.

### 2.2.5. Dispersión atmosférica de contaminantes en el aire

La dispersión de contaminantes en la atmosfera sigue los mismos principios físicos de mezclado de otros fluidos. Cuando una mezcla de aire caliente es

descargada en la atmosfera libre donde existe un viento permanente, esta subirá primero y posteriormente se doblará y viajará con el viento. Este proceso diluye los contaminantes y los aleja de la fuente. [12]

Al mismo tiempo que la pluma se desplaza desde la fuente, el proceso de mezcla atmosférico y la turbulencia producen que la pluma se extienda (disperse) en ambas direcciones lateral y vertical, en todo caso el transporte de la pluma depende de la corriente de aire (viento).

Como se observa en la Figura 2.2, a la vez que la pluma se aleja de la fuente arrastrada por el viento, la altura final de la línea central da la pluma alcanza un valor basado en la flotación térmica (debido a la temperatura de la descarga) y al momento (debido a la velocidad vertical) de la descarga de la chimenea. [12]

El transporte atmosférico ocurre en dos formas básicas: organizada y desorganizadamente. Movimiento organizado se refiere a desplazamiento colectivo de moléculas de aire, en contraposición al movimiento desordenado de moléculas individuales y/o difusión molecular, que se aprecia en los primeros milímetros sobre la superficie y en la atmósfera alta.

El efecto de dispersión y mezcla de la difusión molecular es despreciable frente al de los movimientos organizados. Al respecto suelen distinguirse tres tipos: advección, convección y turbulencia. La advección se refiere al transporte que ocurre por efecto del movimiento promedio de una masa de aire (viento promedio). Normalmente, este término se relaciona con movimientos horizontales, en contraste a los movimientos convectivos que ocurren en la dirección vertical. La convección es un mecanismo rápido de transporte a través de un fluido (aire) debido al ascenso de burbujas que han sido calentadas en niveles inferiores del fluido y el descenso simultáneo de volúmenes de aire más frío que el circundante. La eficiencia de la mezcla

atmosférica, particularmente en la dirección vertical, depende del grado de estabilidad atmosférica. La estabilidad atmosférica tiene que ver con la estratificación térmica de la atmósfera. La situación de mínima energía es una estratificación en la que el aire frío se encuentra por debajo del aire caliente.

Por su parte los movimientos turbulentos son aquellos que no siguen el viento promedio, sino las fluctuaciones de éste en torno a dicho promedio. Este promedio queda determinado normalmente por la resolución temporal de los instrumentos que miden viento y/o a aquellas escalas de movimiento no resueltas por los modelos. [13]

Es importante acotar que la definición del viento en cualquier localización requiere varios parámetros como: la velocidad, la dirección y el tiempo promediado. La velocidad y la dirección del viento están normalmente medidas a una altura de 10 metros sobre el nivel del terreno. Los datos del viento se miden usando un anemómetro estándar de tres tazas para la velocidad y una veleta para la dirección.

Para proporcionar un método convenientemente documentado por los datos meteorológicos, los análisis de dispersión consideran generalmente valores medios horarios para los datos del viento.

### 2.2.6. Modelos de dispersión

Un modelo de dispersión, es una representación matemática de los procesos de transporte y difusión que se presentan en la atmósfera, es por eso que se les conoce como modelos de simulación o de pronóstico. Aún a la fecha, se tiene un conocimiento incompleto de todos los procesos físicos y químicos involucrados en el transporte, dispersión, transformación y deposición de contaminantes. Esto es debido a que la turbulencia atmosférica está en función de un gran número de factores de

estabilidad, los cuales no pueden ser cubiertos en su totalidad por los modelos, aun para los más desarrollados. [14]

Los modelos de dispersión proporcionan un medio para pronosticar a que grado afectarían la calidad de aire de ciertos contaminantes atmosféricos emitidos por una fuente a diferentes distancias.

Los modelos de simulación pueden ser utilizados con diversos objetivos; entre ellos destacan; el desarrollo de estrategias de control, en la evaluación del impacto ambiental, en el análisis de tendencias de calidad de aire, en la selección del sitio apropiado para ubicar estaciones de monitoreo, estudios de diseños de chimeneas, entre otros. Los modelos aplicables a cada uno de los casos ejemplificados pueden variar en complejidad, en la cantidad de datos de alimentación requeridos y en la forma de llegar a los resultados.

### 2.2.7. Tipos de modelos de dispersión

En su gran mayoría los modelos representan un balance de material, es decir, una contabilidad de contaminantes en estudio en unidades de masa/tiempo, la ecuación general es la siguiente: [15]

$$\text{(Velocidad de acumulación)} = \begin{array}{c}\text{(Gastos de entrada - Gastos de salida) +} \\ \text{(Velocidad de creación – Velocidad de destrucción).}\end{array} \quad (2.1)$$

Se han desarrollado muchas técnicas para predecir la concentración de contaminantes en un punto, que incluyen modelos matemáticos para estimar la calidad del aire, algunos son: [15]

### 2.2.7.1. Modelo gaussiano

Los modelos "Gaussianos" son de uso común en problemas de dispersión contaminantes no reactivos de fuentes puntuales tales como chimeneas industriales. Básicamente suponen que el penacho de un efluente presenta una distribución normal o de Gauss (Gaussiana) de las concentraciones en torno al eje de simetría definido por la dirección del viento.
Lo normal es que las columnas de humo suban una distancia considerable por encima de la chimenea, por la razón de que son emitidas a temperaturas mucho mayor que las atmosféricas y con una velocidad vertical.

A medida que un penacho progresa en la dirección del viento, el modelo gaussiano supone que el perfil de concentración por mezcla turbulenta adquiere una distribución gaussiana. Si la condición atmosférica es neutra, entonces se desarrollará un penacho en forma de cono. La concentración en la línea central del penacho será máxima a una distancia cercana del foco emisor y disminuirá en la dirección viento abajo. A medida que la distancia viento abajo aumenta, los extremos del penacho pueden impactar sobre el terreno tal y como se muestra en la Figura 2.3. [15]

La técnica Gaussiana es la que se usa mayormente para contaminantes no reactiva, proporciona una buena aproximación matemática a la dispersión de contaminantes**.**
El modelo gaussiano realiza las siguientes suposiciones:

- No existe variación ni en la velocidad ni en la dirección del viento entre el foco y el receptor.
- Todo el vertido permanece en la atmósfera, es decir no reacciona, ni se deposita en forma de lluvia o partículas. Cualquier pluma que impacta en el terreno rebota en su totalidad.
- La dispersión describe exactamente una distribución de Gauss.

Cabe hacer notar que estos modelos son aptos para estimar efectos locales y que su grado de precisión y acierto es, en general, decreciente en tanto se aplican en localidades con relieve complejo y caracterizado por circulaciones atmosféricas complejas.

### 2.2.7.2. Modelos estadísticos o empíricos

Las técnicas estadísticas o empíricas son frecuentemente empleadas donde los procesos químicos y físicos no poseen una clara interpretación científica, o en situaciones donde no se cuente con una fiable y completa base de datos.

Están basados en técnicas estadísticas o semi-empiricas para analizar tendencias, relaciones de la calidad del aire, las mediciones atmosféricas y para la evolución de contaminación de corto plazo. Lo anterior se hace utilizando análisis de distribución de frecuencias, análisis de series de tiempo y otros métodos estadísticos.

### 2.2.7.3. Modelos físicos

Los modelos físicos tratan de simular los procesos atmosféricos por medio de una representación a escala reducida de la verdadera situación. Estos modelos involucran el uso de túneles de viento, canales de agua u otros medios para modelar fluidos. Requieren de un alto nivel técnico especializado, así como el acceso a los recursos necesarios.

Esta es la mejor técnica y la más aproximada a la realidad, sin embargo, es poco utilizado por los recursos que se deben disponer.

### 2.2.7.4. Modelos numéricos

Los modelos numéricos son obtenidos a partir de las características físicas y químicas, relacionadas con los fenómenos de transporte, difusión, transformación y remoción de los contaminantes. Para este método se requiere resolver las ecuaciones fundamentales que rigen el comportamiento del fluido para predecir el comportamiento de los mismos.

### 2.2.8. Principios básicos de la mecánica de los fluidos

Desde el punto de vista de la Mecánica de los fluidos, la materia solo puede presentarse en dos fases: sólido y fluido.

La distinción técnica entre ellos radica en la relación de ambos a un esfuerzo tangencial o cortante. Un sólido puede resistir un esfuerzo cortante con una deformación estática; un fluido no. Cualquier esfuerzo cortante aplicado a un fluido, provocará el movimiento del mismo. Este se mueve y se deforma continuamente mientras se siga aplicando el esfuerzo cortante. [16]

Se puede decir que existen dos clases de fluidos, líquidos y gases. De nuevo la distinción es técnica y concierne al efecto de las fuerzas cohesivas. Un líquido por estar compuesto por agrupaciones de moléculas muy cercanas con enormes fuerzas cohesivas, tiende a conservar su volumen y formará una superficie libre en un campo gravitatorio si no está limitado por arriba. Por el contrario, como las moléculas de gas están muy separadas entre sí, con fuerzas cohesivas despreciables, un gas es libre de expandirse hasta que encuentre paredes que lo confinen. Un gas no tiene volumen definido y por si mismo, sin confinamiento, forma una atmosfera que es esencialmente hidrostática.

Los gases no forman superficies libres y en los flujos gaseosos raramente influyen otros efectos gravitatorios distintos a los de flotabilidad.

### 2.2.9. Ecuaciones de gobierno

Las leyes que rigen el movimiento de una partícula fluida son conocidas desde mediados del siglo XIX. Son las denominadas ecuaciones de Navier-Stokes, que pueden expresarse con distintas nomenclaturas, en distintos sistemas de referencia y con distintas notaciones. Para un fluido Newtoniano, se puede expresar así. [17]

Continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \bullet (\rho U) = 0 \qquad (2.2)$$

Cantidad de movimiento

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + \nabla \bullet (\rho U \otimes U) = \nabla \bullet \left(-p\delta + \mu(\nabla U + (\nabla U)^{T})\right) + S_M \qquad (2.3)$$

Energía

$$\frac{\partial \rho h_{tot}}{\partial t} - \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \bullet (\rho U h_{tot}) = \nabla \bullet (\lambda \nabla T) + \nabla \bullet \left(\mu \nabla U + \nabla U^{T} - \frac{2}{3} \nabla \bullet U \delta U\right) S_E \qquad (2.4)$$

Donde:

$U$= Vector velocidad del fluido

p = Presión

t = Tiempo

T = Temperatura

$\rho$ = Densidad del fluido

$\delta$ = Matriz identidad

$\mu$ = Viscosidad dinámica

$\lambda$ = Conductividad térmica

$S_M$ = Fuente de momentum

$S_E$ = Fuente de energía

$h_{tot}$ se define como la Entalpia específica Total, que para el caso general de propiedades variables y flujo compresible se da en términos de entalpía estática específica, h, mediante:

$$h_{tot} = h + \frac{1}{2}U^2 \tag{2.5}$$

Donde:

$$h = (p, T) \tag{2.6}$$

Estas ecuaciones están obtenidas teniendo en cuenta que cualquier evolución física de un sistema está gobernada por leyes de conservación. El concepto de conservación significa que la variación de una determinada magnitud intensiva o propiedad en un determinado volumen es debida al efecto neto de las fuentes internas de esa magnitud y al efecto del flujo de esa magnitud que atraviesa la frontera del volumen que define al sistema. [18]

Algunas veces, en las técnicas numéricas no se intenta resolver estas ecuaciones directamente sino que se adimensionalizan de forma que, por un lado, resulte más cómodo manejar las ecuaciones sin preocuparse por las unidades y, por otro, se puedan llegar a despreciar términos por su valor muy inferior al resto.

Ya sea una forma dimensional o adimensional, se trata de un sistema de cinco de ecuaciones diferenciales de segundo orden no lineal y no estacionario. Las incógnitas o variables dependientes son la velocidad (3 componentes), la presión, la temperatura, la densidad y la entalpia. Para su correcta solución se deberá disponer de dos ecuaciones termodinámicas algebraicas, la ecuación de estado, que relacione la densidad con la presión y la temperatura y la ecuación constitutiva, que relacione la entalpia con temperatura y la presión. La solución analítica de estas ecuaciones con las correspondientes condiciones de contorno y condiciones iníciales definiría el campo de flujo en una geometría dada. Sin embargo, es imposible encontrar una solución analítica exacta de estas ecuaciones.

### 2.2.10. Dinámica de fluidos computacional

El movimiento de los fluidos en ciertos pasajes, y en general en formas complejas, constituye unas de las tareas más difíciles para estudiar analíticamente. Las ecuaciones diferenciales parciales que gobiernan la mecánica de los fluidos y la transferencia de calor incluyen la ecuación de continuidad (conservación de la masa), las ecuaciones de Navier-Stokes (conservación del momento o segunda ley de Newton) y la ecuación de la energía (conservación de la energía o primera ley de la termodinámica).

Estas ecuaciones son complejas, se relacionan íntimamente y son no lineales, lo que hace imposible una solución analítica como se mencionó, por esta razón se emplean métodos apróximados o numéricos para determinar la solución de dichas ecuaciones.

Se dispone de diversos métodos numéricos para efectuar lo anterior, a los que en conjunto se les denomina dinámica de fluidos computacional (CFD sus siglas en ingles), los cuales utilizan un método para discretizar el dominio de interés con el objeto de reducir las ecuaciones complejas que lo gobiernan, a un conjunto de

ecuaciones algebraicas en puntos o nodos sobre cada elemento dentro del dominio. [19]

#### 2.2.10.1. Metodología del CFD

El proceso de realizar una simple simulación de CFD se divide en cuatro componentes. [17]

- **Geometría/mallado**

Este proceso interactivo es la primera etapa del pre-procesamiento. El objetivo es producir un mallado para la entrada al pre-procesador. Antes de que un mallado pueda ser producido, se requiere una geometría. Los pasos básicos implican:

  - Definir la geometría de la región de interés.
  - Definir regiones donde se establecerán las distintas condiciones de frontera
  - Fijar las propiedades del mallado.

Esta etapa del pre-procesamiento es ahora altamente automatizada. La geometría puede ser importada de la mayoría de paquetes de CAD más importantes, y el mallado sobre el mismo, es generado automáticamente.

- **Definición física**

Este proceso interactivo es la segunda etapa del pre-procesamiento y se utiliza para crear la entrada requerida por el solucionador. Los archivos del mallado son cargados en la física del pre-procesador.

Se seleccionan los modelos físicos que deben ser incluidos en la simulación. Propiedades del fluido y se especifican las condiciones de borde.

- **Solucionador (solver)**

El componente que soluciona los problemas en CFD se llama el solucionador. Este produce los resultados requeridos en un proceso iterativo. Problemas de CFD son solucionados de la siguiente manera:

- Las ecuaciones diferenciales parciales son integradas sobre todos los volúmenes de control de la región de interés. Esto es equivalente a aplicar una ley básica de la conservación (por ejemplo, para masa o cantidad de movimiento) a cada volumen de control.

- Estas ecuaciones integrales se convierten a un sistema de ecuaciones algebraicas por generación de un sistema de aproximaciones para los términos en las ecuaciones integrales.

- Las ecuaciones algebraicas son resueltas iterativamente.

Un procedimiento iterativo es requerido debido a la naturaleza no lineal de las ecuaciones, y cuando la solución acerca a la solución exacta, este se dice converger. Para cada iteración, un error, o residual, es reportado como una medida de la conservación total de las características del flujo.

Como el cierre de la solución final es un acercamiento a la solución exacta, esta depende de un número de factores, incluyendo el tamaño y la forma de los volúmenes del control y del tamaño de las residuales finales.

Los procesos físicos complejos, tales como combustión y turbulencia, son a menudo modelados usando relaciones empíricas. Las aproximaciones inherentes en estos modelos también contribuyen a diferencias entre la solución del CFD y el flujo verdadero.

El proceso de la solución no requiere ninguna interacción del usuario, y el solucionador produce un archivo de los resultados que entonces se pasa al post-procesador.

- **Post-procesador**

El post-procesador es el componente usado para analizar, visualizar y para presentar los resultados interactivamente. El post-procesamiento incluye la obtención de valores de cualquier punto de las secuencias animadas complejas.

Algunos ejemplos importantes de las características del post-procesador son:

- Visualización de la geometría y volúmenes de control.
- Demostración de los diagramas vectoriales de la dirección y magnitud del flujo.
- Visualización de la variación de las variables en el dominio.
- Cálculos numéricos cuantitativos.
- Animación.
- Cartas que demuestran diagramas gráficos de variables.

### 2.2.11. Discretización de las ecuaciones del flujo

A lo largo de la historia de los métodos numéricos aplicados en la Mecánica de Fluidos muchas han sido las aproximaciones o formas de pasar del modelo físico-matemático al modelo numérico discreto. [18]

La aplicación de las leyes básicas de la Física permite obtener las relaciones entre las distintas variables involucradas en un fenómeno físico dado, a través de un conjunto de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. Por desgracia, debido a su complejidad, rara vez es posible resolverlas de un modo exacto (solución analítica del problema) y es necesario buscar métodos alternativos que proporcionen una buena predicción, es decir, métodos que proporcionen una solución numérica aproximada. Así, la solución numérica aproximada se obtendrá a partir de la resolución de una serie de relaciones algebraicas obtenida mediante técnicas de discretización de las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. [18]

Existen varias técnicas de discretización, dependiendo de los principios en que se basen. Las más usadas son: diferencias finitas, volúmenes finitos y elementos finitos. A continuación se describe el método de volúmenes finitos, que es el utilizado por el programa de CFD.

#### 2.2.11.1. Método de los volúmenes finitos

Este método constituye la técnica comúnmente empleada en la discretización de las ecuaciones de gobierno. Se desarrolló específicamente para resolver problemas de transferencia de calor y de mecánica de fluidos. Parte del hecho de que las leyes básicas de la mecánica de fluidos son leyes de conservación y pueden ser expresadas en forma de balances macroscópicos de las distintas variables. [18]

En primer lugar se define una división del dominio en celdas, que constituyen el mallado del dominio a estudiar. A continuación se aplican los balances de los flujos de las distintas variables en los volúmenes construidos a partir del mallado definido.

Para cada uno de los volúmenes el balance de los flujos de una determinada variable proporciona información sobre el valor medio de dicha variable en el interior del mismo. Desde el punto de vista práctico, el método consiste en ir sustituyendo las integrales de las ecuaciones generales de conservación por sumatorias sobre las caras del volumen, que indicarán la forma de variación de dicha variable para cada volumen elemental, llegándose a la expresión:

$$\Delta(Variable) = (\sum_1^n (Flujos + Terminos\ fuente))\frac{\Delta t}{\vartheta} \qquad (2.7)$$

Donde $\vartheta$ es el volumen de cada celda, n es el número de las caras del volumen y los términos de flujo se evalúan en la dirección normal de cada cara.

Los valores de las distintas variables en las caras (superficies o lados) de los distintos volúmenes no son conocidos y se requiere de algún tipo de interpolación numérica para su cálculo. La selección de los volúmenes, así como la de las interpolaciones, dan lugar a una gran variedad de métodos. [18]

Una vez discretizadas las ecuaciones diferenciales, lo que se obtiene es un sistema de ecuaciones algebraicas que se pueden escribir en notación matricial, y se resuelven a través de dos tipos de métodos de solución: los directos y los iterativos.

Los métodos directos son todos aquellos que necesitan la inversión de la matriz completa. Los métodos iterativos tratan de hallar la solución partiendo de una solución estimada y calculando, a partir de ella, una solución mejorada, acercándose a la solución real.

#### 2.2.11.2. Discretización del dominio

Las técnicas numéricas para la generación de un mallado donde se resolverán las ecuaciones de gobierno se definen como procedimientos para la distribución ordenada de observadores o estaciones de toma de datos en un dominio físico, de forma que exista la posibilidad de una comunicación eficiente entre los distintos observadores y los fenómenos físicos que ocurran, y estén representados con la suficiente exactitud por medio de observadores. [20]

Los mallados se pueden clasificar atendiendo a dos criterios: la forma de definir las fronteras del dominio y la conectividad entre los distintos observadores o puntos del mallado (nodos).

En cuanto a la forma de definir las fronteras, están los mallados conformes (no interpolan en la definición de la frontera) y los no conformes (que no definen la frontera real sino una aproximación numérica de la misma).

Atendiendo al criterio de conectividad o estructura de los datos del mallado, existen dos métodos de generación de mallado que darían lugar a los dos tipos de mallado básicos: los estructurados y los no estructurados.

- **Mallado estructurado**

Este tipo de mallado los observadores se colocan siguiendo una red de familias de líneas coordenadas que permiten visualizar la relación entre unos y otros de forma directa. Este hecho simplifica mucho los algoritmos respecto a lo que sería un mallado no estructurado. En este tipo de mallado la región a estudiar se subdivide en rectángulos o cubos (según se trate de problemas bidimensionales o tridimensionales). [18]

Se muestra un ejemplo en la Figura 2.4. Sus características más relevantes son las siguientes:

- No es necesario dar la conectividad explícitamente en la formación del mallado ya que los nodos vecinos son conocidos.
- El dominio es transformado sobre un rectángulo o cubo subdividido uniformemente en celdas.
- Puede ser necesaria una transformación del dominio.

Ventajas

- La conectividad ordenada, conduce a resoluciones más simples y, es ideal para computadores vectoriales
- Se requiere de menos memoria para el almacenamiento de las variables
- La suavización y ortogonalidad pueden ser controlados fácilmente.

Desventajas

- El manejo de geometrías complicadas no es flexible
- La adaptabilidad solo es posible añadiendo o moviendo líneas de mallado (2D) o superficies de mallados (3D), lo cual no lo hace flexible

- El movimiento de contornos es difícil de manejar

- **Mallado no estructurado**

Existen dos técnicas básicas: el avance frontal y la triangularización de Delaunay. La primera consiste en la construcción de triángulos o tetraedros partiendo de la definición de la frontera del dominio hasta completar el mismo. La triangularización de Delaunay parte de una serie de puntos o nodos y los triángulos o tetraedros se construyen de forma que dichos puntos son correspondientes centro de masas. [21]

Ventajas:

- Flexibilidad de manejar geometrías complicadas, adaptabilidad, movimientos de contornos como se aprecia en la Figura 2.5.
- Las celdas pueden ser polígonos, cuadriláteros, triángulos, etc.

Desventajas:

- Requiere mayor almacenamiento de variables y precisa un direccionamiento indirecto.
- Las resoluciones son más complicadas en general.
- La exactitud es más baja, en general, debido a la falta de suavidad del mallado.

En cualquiera de los dos casos (estructurado o no estructurado), el mallado debería cumplir una serie de requisitos genéricos:

- Ajuste a las fronteras de la región a estudiar de forma que las condiciones de contorno queden representadas con la mayor exactitud posible.

- El mallado debe distribuirse localmente de la forma más regular posible, con variaciones suaves de densidad. La densidad de un mallado se define como el número de puntos por unidad de superficie o volumen.
- La mayor densidad del mallado se debe localizar donde se espere que las variaciones espaciales de la solución sean mayores.
- El mallado debería ajustarse dinámicamente a las variaciones de las variables en la solución del flujo.

### 2.2.12. Modelado de transporte de partículas

En el modelo de transporte de partículas, el flujo total de la fase de partículas es modelada por el seguimiento de un pequeño número de partículas a través del fluido continuo. Para el estudio las partículas son sólidas y el modelo de transporte de partículas utilizado es el lagrangiano.

La aplicación del seguimiento langragiano, dentro del software CFD, implica la integración de la trayectoria de las partículas a través del dominio discretizado. Las partículas individuales se siguen desde su punto de inyección hasta que escapan del dominio. Cada partícula se inyecta, alternadamente, para obtener un promedio de todas las trayectorias de las partículas y para generar términos fuente a las ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento. Debido a que cada partícula es seguida desde su punto de inyección hasta su destino final, el procedimiento es aplicable a análisis de flujo en estado estable.

Las partículas se calculan usando el esquema de integración hacia adelante de Euler de la velocidad de la partícula a través del paso del tiempo, δt.

$$x_i^n = x_i^o + v_{pi}^o \delta t \tag{2.8}$$

Donde los índices *o* y *n* se refieren a la posición anterior y a la nueva posición de la partícula respectivamente y $v_{pi}$ es la velocidad de la partícula. En la integración hacia adelante, la velocidad de la partícula es calculada al iniciarse el paso del tiempo. Al finalizar el paso del tiempo, la nueva velocidad de la partícula es calculada usando la solución analítica. (Ec. 2.9)

$$v_p = v_f + (v_p^{\circ} - v_f)exp\left(-\frac{\delta t}{\tau}\right) + \tau F_{all}\left(1 - exp\left(-\frac{\delta t}{\tau}\right)\right) \qquad (2.9)$$

Las propiedades del fluido se toman a partir del inicio del paso de tiempo. En el cálculo de todas las fuerzas, es necesario determinar muchas variables del fluido, tales como densidad, viscosidad y velocidad con la posición de la partícula. Estas variables se obtienen siempre con suficiente precisión en el elemento en el cual la partícula está viajando, calculando la posición computacional dentro de dicho elemento, y usando las funciones de forma del algoritmo de discretización para interpolar la posición de la partícula. [17]

### 2.2.13. Fundamento para el modelado del flujo turbulento

La turbulencia se define como el estado de movimiento de un fluido en el que las distintas variables relevantes (presión, velocidad, etc.) fluctúan de una forma desordenada. Se trata de un estado no estacionario desde el punto de vista macroscópico en el que las distintas variables adoptan valores dependientes tanto de la posición como del tiempo y esos valores varían de una forma aleatoria y desordenada.

La descripción del movimiento de las partículas fluidas debido al efecto de la turbulencia resulta altamente complejo y constituye un problema aun sin solución

desde el punto de vista de los métodos numéricos. Los métodos más conocidos son simulación directa, simulación de los grandes vórtices y promediado temporal de las ecuaciones de Navier-Stokes. En el presente trabajo se utilizará este último.

#### 2.2.13.1. Modelos que promedian temporalmente las ecuaciones de Navier-Stokes (RANS)

Habitualmente lo que interesa son los efectos de la turbulencia sobre los valores medios de las variables: la velocidad media y la presión media en el caso del flujo en un conducto; en el caso de un avión, las fuerzas medias de resistencia y sustentación: para el caso de un motor, los efectos de la turbulencia sobre las relaciones de mezcla entre combustibles y carburante.

Para conseguir ésto, las ecuaciones de Navier-Stokes se promedian sobre las escalas de las fluctuaciones de turbulencia (RANS). Estos métodos dan lugar a un campo de flujo promediado y simulado que es más uniforme que el flujo real, y, por lo tanto, reduce drásticamente la discretización espacial y temporal necesaria para la obtención de las variables desconocidas.

Los modelos de promedio de las ecuaciones de Navier-Stokes (Reynolds Averaged Navier-Stokes) han sido muy estudiados y resultan bastante útiles en la mayoría de los problemas prácticos resueltos mediante técnicas numéricas. [22]

El procedimiento de promediar las leyes que describen el movimiento de una partícula se introduce en las ecuaciones con el fin de obtener los comportamientos promedio y turbulento (aleatorio) de las distintas variables. El punto de partida es muy sencillo. Se trata de obtener una descomposición de las variables en su valor medio y su valor fluctuante. Por ejemplo, para la velocidad, la descomposición seria:

$$\vec{u} = \bar{\vec{u}} + \overrightarrow{u'} \tag{2.10}$$

Donde la componente media de la velocidad se obtiene haciendo la integral de la velocidad instantánea

$$\bar{\vec{u}}(t) = \frac{1}{T}\int_0^T \vec{u}(t).\,dt \tag{2.11}$$

Suponiendo que el período de integración T, es lo suficientemente grande en comparación con la escala temporal de la turbulencia, pero lo suficientemente pequeño como para captar cualquier fenómeno no estacionario distinto a la turbulencia. La utilización de este tipo de método es bastante adecuada, pues la mayoría de los fenómenos no estacionarios en Mecánica de Fluidos tiene lugar a frecuencias con rangos muy alejados del rango de frecuencias de la turbulencia.

El proceso de promediado temporal de las ecuaciones diferenciales, da lugar a unos términos, denominados tensiones de Reynolds ("Reynolds stresses"), que involucran medias de los productos de la fluctuaciones de los componentes de la velocidad, cuya relación con la componentes medias del flujo es desconocido. Para obtener dicha relación es necesario introducir un modelo adicional, denominado modelo de turbulencia o de cierre.

Un modelo de turbulencia es un procedimiento numérico que permite relacionar los valores medios de las fluctuaciones de la variables con los valores promedios (en la nomenclatura propia de estos métodos, se habla de cerrar el sistema de ecuaciones), de forma que se puedan resolver las ecuaciones de gobierno. Un modelo de turbulencia será útil, dentro de un programa de CFD de propósito general, si es

exacto, sencillo y económico (computacionalmente hablando). Los modelos de turbulencia más comunes son los siguientes: [22]

- Modelo de longitud de mezcla.
- Modelo K- Epsilon (con multitud de variantes).
- Modelos de Esfuerzos cortantes de Reynolds.

### 2.2.14. Número de Stokes

El número de Stokes es un parámetro muy importante en flujos fluido-partículas, está relacionado con la velocidad de la partícula y se define como:

$$St_v = \frac{t_v}{t_f} \tag{2.12}$$

Donde $t_f$ es algún tiempo característico del campo de flujo, por ejemplo el tiempo característico de flujo de un venturi puede ser de DT/U, donde DT es el diámetro de la garganta y U es la velocidad de flujo. El número de Stokes se convierte en:

$$St_v = \frac{t_v \cdot U}{D_t} \tag{2.13}$$

Si $S_{tv} << 1$, el tiempo de reacción de las partículas es mucho menor que el tiempo característico asociado con el campo de flujo, así las partículas tendrán un amplio tiempo de responder a los cambios en la velocidad del fluido. Por lo tanto las velocidades de las partículas y el fluido serán prácticamente iguales.

Por otra parte si la $S_{tv}$ >>1, entonces la partícula no tendrá tiempo de responder a los cambios de la velocidad del fluido y la velocidad de la partícula será poco afectada durante su paso a través del venturi.

### 2.2.15. Criterio de convergencia

El programa comercial de fluidodinámica computacional, utilizado; calcula residuos normalizados para calificar la convergencia de los problemas simulados. El solucionador emplea el residuo normalizado para detener una ejecución cuando se ha alcanzado un nivel de residual específico. La tasa de convergencia viene dada por la ecuación  en la cual $R_n$ es el residual de la iteración y $R_{n-1}$ es el residual de la iteración anterior. [17]

$$Rate = \frac{R_n}{R_{n-1}} \tag{2.14}$$

El programa permite seleccionar el criterio para detener la ejecución entre dos normas disponibles para el cálculo de los residuos.

La norma "Raíz del Promedio de los Cuadrados" (Root Mean Square, *RMS* por sus siglas en inglés), la cual eleva al cuadrado el residual normalizado en cada volumen de control del dominio, luego suma esos cuadrados, los promedia y finalmente saca la raíz cuadrada a este valor:

$$RMS = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(r)^2} \tag{2.15}$$

Donde n es el número de volúmenes de control en el dominio y r es el residual de cada uno de esos volúmenes.

La segunda norma conocida como MAX establece que el valor del residual es igual al valor absoluto del máximo residuo en todo el dominio:

$$MAX = max|r| \tag{2.16}$$

# CAPÍTULO III

# MARCO METODOLÓGICO

En este capítulo se desarrollan cada uno de los eventos que se pusieron en práctica, con fundamento en investigaciones previas y las bases teóricas, a objeto de alcanzar los resultados esperados en la investigación y con ello dar respuesta a la solución de la situación objeto de estudio, con el fin de conocer y evaluar los efectos de los gases de combustión expulsados por la nueva chimenea instalada en la unidad de Craqueo Catalítico Fluidizado, en la Refinería de Puerto La Cruz, Estado Anzoátegui, llevado a cabo a través del procedimiento que se describe en la Figura 3.1:

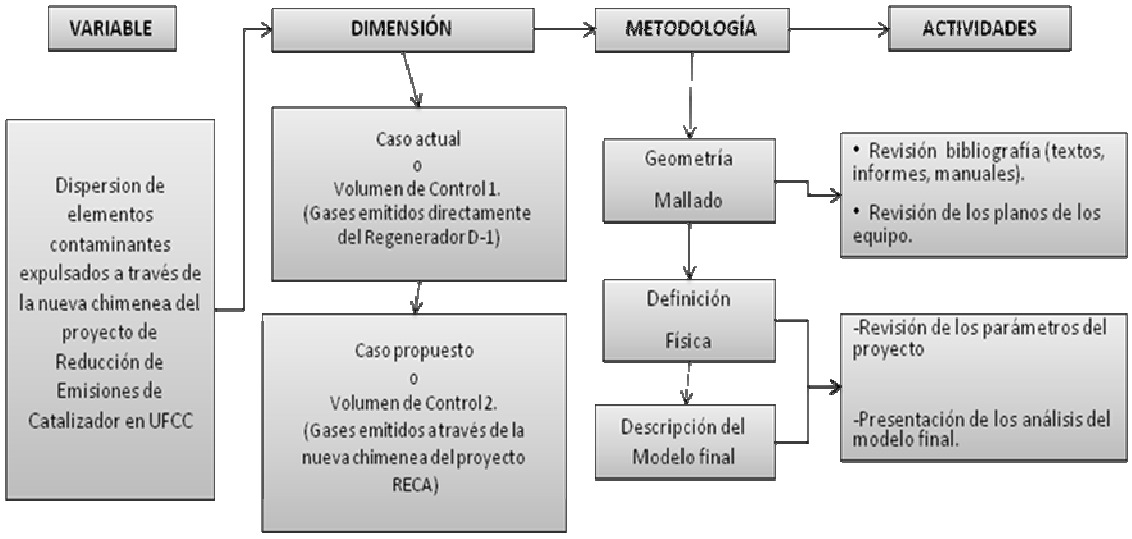


Figura 3.1 Desarrollo sistemático de la investigación.

Fuente: Propia, (2010).

## 3.1. Geometría/mallado

### 3.1.1. Geometría

El estudio se desarrolla en la Unidad de Craqueo Catalítico Fluidizado localizada en el Bloque F-4, en la Calle 34, entre las Avenidas F y G, de la Refinería Puerto La Cruz. Se parte de la delimitación de la zona estudio la cual posee las siguientes dimensiones: 65 m de radio y una altura de 100 m. representada en escala real y fueron tomadas de los planos facilitados por la empresa (Pdvsa).

A objeto del dominio físico se crearon dos geometrías, haciendo uso de un programa de diseño asistido por computadora para modelado mecánico, las cuales representan una simplificación del área de estudio donde se ubicaron los equipos afectados por la expulsión gases de combustión. La primera geometría, representó la configuración de la situación actual, donde los gases de combustión son expulsados directamente del regenerador D-1, tal como se representa en la Figura 3.2. (ver Tabla 3.1)

Mientras que la segunda geometría representa la nueva chimenea, no operativa aún, donde serán expulsados los gases de combustión a la atmósfera, como se muestra en la Figura 3.3.

En este orden de idea, se trata de una simplificación, ya que solo se muestran los equipos de mayor altura en la zona, descartándose las estructuras metálicas que sirven de apoyo a los equipos de separación (STE y SCE) como a la línea de gases de combustión. Estos comprenden los diferentes tramos de tubería que conducen los gases de combustión desde el regenerador D-1, pasando por los diferentes equipos que conforman el sistema de reducción de emisiones de catalizadores, antes de expulsarlos a la atmósfera por la chimenea.

En este sentido se estableció una geometría circular con el propósito de poder simular las diferentes direcciones del viento, utilizando únicamente estas dos geometrías. Estas áreas de estudio posee las siguientes dimensiones: 65 m de radio y una altura de 100 m. Todas las medidas están a escala real y fueron tomadas de los planos facilitados por la empresa (Pdvsa).

Por otra parte se identificaron los equipos que se tomaron en cuenta en las dos geometrías como se evidencian con todas sus características en la Tabla 3.1.

Tabla 3.1 Equipos que se encuentran en el dominio.

Fuente: Propia, (2010).

| Nombre | Nomen-clatura | Posición con respecto al D-1 (coordenadas) | Altura (m) | Diámetro (m) |
|---|---|---|---|---|
| Tambor almacenamiento de catalizador fresco | F-8 | 8,028 ; -16,263 | 8,8138 | 1,988 |
| Tambor almacenamiento de catalizador fresco | F-1 | 4,737 ; -12,148 | 17,9 | 5,264 |
| Torre de fraccionamiento | E-1 | 11,55 ; 8,88 | 27,53 | 3,232 |
| Unidad Regeneradora | D-1 | 0 ; 0 | 56,5 | 7,495 |
| Caseta | ---- | 20,85 ; -2,542 | 8 | 14,41 x 11,20 |
| Chimenea | ---- | 0 ; 0 | 24,68 | 2,072 |
| Separador de Tercera Etapa | STE | 11,905 ; -29,6649 | 16,91 | 7,044 |
| Separador de Cuarta Etapa | SCE | 6,413 ; -33,8529 | 20,86 | 2,318 |

Cabe destacar que si bien estas geometrías resultaron huecas, a los efectos de las simulaciones lo que se pretendía obtener como geometría era el espacio vacío que representa el volumen donde interactúan los fluidos. Para ello se recurrió al programa de Dinámica de Fluido Computacional en el modulo de Diseño de Modelo (Design Modeler), donde se importó el modelo creado con anterioridad y con la aplicación encerramiento (Enclosure) se crean 2 volúmenes adicionales: el interno delimitado por la superficie interior de la geometría importada, y uno externo que encierra toda

la geometría y es delimitado por la superficie exterior de la geometría importada. De estos volúmenes generados solo seleccionamos el interno como se mencionó.

La aplicación encerramiento (Enclosure) permitió encerrar el modelo o geometría con un volumen preestablecido de tal forma que todos los espacios encerrados o espacios huecos en el modelo, se transforma en volúmenes seleccionables. Hay que hacer énfasis en que la geometría tiene que estar completamente cerrada para que esta herramienta funcione correctamente.

La geometría obtenida después de llevar a cabo el uso de la herramienta Enclosure se muestra en la Figura 3.4. Este mismo proceso se llevó a cabo para obtener la geometría del volumen de control 2.

### 3.1.2. Mallado

En orden de lograr la solución numérica de las ecuaciones que rigen el comportamiento de los fluidos, el dominio de cálculo debe ser discretizado. En ese sentido, a través del programa se selecciona cierto conjunto de sub-dominios a partir de los cuales se resuelven las ecuaciones y finalmente se conocerán los valores de las variables a estudiar. La definición de estos sub-dominios es lo que se denomina discretización espacial. Este proceso incluye dos fases, como se describen a continuación**.**

#### 3.1.2.1. Construcción del mallado

El conjunto de sub-dominios constituye la malla computacional, el cual debe cubrir todo el dominio. Para esta investigación se empleó el método de los volúmenes finitos, primero, por tener mayor ventaja sobre los otros métodos y segundo, porque es la metodología que usa por defecto el programa CFD. La resolución numérica de

las ecuaciones discretizadas por la técnica de volúmenes finitos calcula los valores de las variables fluidas en el interior de las celdas computacionales.

Hoy en día los paquetes comerciales del CFD, vienen con sus propios generadores de malla, pero también están disponibles programas para generar mallas independientes. Las mallas que se emplearon en la simulación en el presente proyecto fueron generadas en un módulo que trae integrado el Programa de CFD. Este módulo además de generar el mallado, posee diversas aplicaciones que permiten hacer pequeñas modificaciones a la geometría con el fin de mejorar y controlar la construcción del mallado en el mismo.

Como se puede observar en el cilindro que limita el volumen de control de la Figura 3.3 está dividido en 16 partes, realizadas con el fin de poder simular con el mismo modelo diferentes direcciones del viento. Esta condición resultó útil sólo en las paredes del cilindro, por lo tanto, las divisiones que hay en la parte superior e inferior del mismo son innecesarias y podían perjudicar la calidad del mallado. Para corregir esta situación se utilizó la herramienta Caras Virtuales (Virtual Faces).

Estas Caras Virtuales son creadas mediante la fusión de dos o más caras de la geometría para hacer una mayor superficie, de modo de evitar tener que mallar caras individuales. Normalmente una malla de superficie se crea para cada cara de cada cuerpo que se está mallando. Para producir una malla de calidad razonable en una cara que sea muy estrecha, puede que se tenga que utilizar una escala de longitud de malla que para las regiones del modelo físico del CFD no se necesita. En todo caso se pueden combinar caras tan estrechas con otras caras, logrando aumentar drásticamente la escala de longitud de malla en esta región, lo que resultará en una malla con menos elementos. Además, puede ser capaz de combinar las caras juntas, de tal manera que los ángulos muy pequeños en la superficie original se eliminan, lo

que también conduce a una malla de mayor calidad. En las Figuras 3.5, 3.6 y 3.7, se pueden apreciar la mejora en la calidad del mallado utilizando esta herramienta.

El proceso de generación de malla es completamente automático. Sin embargo, tiene un control considerable sobre cómo los elementos se deben distribuir en la malla, con el fin de asegurar que se consiga la mejor solución posible de CFD con los recursos de computación disponibles.

Para la construcción del mallado no estructurado se empleo el método de Avance Frontal: el cual produce una malla de superficie triangular a través del método de Delaunay; una malla de volumen, mediante el método de Avance Frontal, que puede contener elementos en forma de tetraedros, prismas y pirámides.

Algunas condiciones que genera el mallado por defecto fueron tomadas en cuenta, sin embargo, el uso de estas herramientas permitieron personalizar la malla generada, refinando aquellas zonas de mayor interés donde se quisiera conocer con más precisión los valores de las distintas variables que se estudian.

El dominio en estudio se construyó el mallado con un espaciado de cara con características que se describen a la Tabla 3.2.

Tabla 3.2 Propiedades del espaciado de cara.

Fuente: Propia, (2010).

| **Tipo de espaciado de cara** | Resolución angular |
|---|---|
| **Angulo de resolución (grados)** | 30 |
| **Longitud mínima de arista (mm)** | 400 |
| **longitud máxima de arista (mm)** | 5.000 |

Se requirió de refinamiento local en dos lugares específicos, como lo son: la caseta y la chimenea, ya que con las características del espaciado de caras previamente

establecido generaba elementos que no se distribuían de forma regular provocando así una variación excesiva en la densidad de la malla. Para ello se crearon espaciados donde sus características se muestran en las Tablas 3.3 y 3.4.

Tabla 3.3 Propiedades del espaciado de cara en la Caseta.

Fuente: Propia, (2010).

| **Tipo de espaciado de cara** | Resolución angular |
|---|---|
| **Angulo de resolución (grados)** | 18 |
| **Longitud mínima de arista (mm)** | 460 |
| **Longitud máxima de arista (mm)** | 1.000 |

Tabla 3.4 Propiedades del Espaciado de Cara en la Chimenea.

Fuente: Propia, (2010).

| **Tipo de espaciado de cara** | **Resolución angular** |
|---|---|
| **Angulo de resolución (grados)** | 18 |
| **Longitud mínima de arista (mm)** | 200 |
| **Longitud máxima de arista (mm)** | 500 |

En la Figura 3.8, tomando como ejemplo el mallado que se genera en la caseta del dominio (Tabla 3.1), se presenta una comparación, donde se observa la diferencia en el tamaño de elemento y por ende en la densidad del mismo. Esta manipulación del mallado se llevó a cabo creando un espaciado de cara independiente y que solo tendrá efecto en las caras o superficies que representan la caseta.

Una de las zonas de interés en cuanto a la interacción, perturbación y disipación de los fluidos es en la salida de la chimenea, punto donde se encuentran las dos corrientes de fluido, tanto el viento y los gases expulsados por la chimenea. Para una mayor exactitud en las variables de estudio se requirió de un refinamiento en esa región del dominio, de modo de observar el comportamiento de los fluidos.

Para hacer posible este refinamiento, se hizo uso la herramienta denominada Control, a objeto de refinar la superficie y el volumen de malla en las regiones específicas del modelo. El efecto de refinación de la malla decae al aumentar la distancia desde el control, generando elementos cada vez más grandes. Los controles pueden ser definidos usando cualquier punto de la modelo (por ejemplo, las esquinas de las caras) o mediante la especificación de coordenadas. Se pueden ubicar en cualquier parte del espacio 3D de su modelo: interior, exterior o en el borde.

Hay tres tipos de controles volumétricos disponibles: Punto, Línea y Triángulo. Para el estudio se aplicó el punto para establecer el control justo en la salida de la chimenea. Los elementos inmersos en el volumen azul presentado en la Figura 3.9, estarán controlados tanto en tamaño y la forma como crecerá cada elemento desde su interior.

Las regiones próximas a la pared, dan lugar a los efectos de separación en la capa límite. De manera tal que se requiere de un mallado computacional eficiente en estas regiones, donde, si se usan elementos Tetraédricos, se tendría que generar una malla superficial excesivamente fina, para así evitar la formación de elementos tetraédricos muy distorsionados en dichas caras.

Para evitar este problema en el estudio se aplicó un mallado de “inflación” en las paredes, con la finalidad de observar con mejor precisión los efectos de separación en la capa límite. Este método busca convertir elementos tetraédricos (por defecto) en elementos del tipo prismático sólo en los bordes o aproximaciones a las paredes. Por ejemplo, en una tubería se crean dichos elementos prismáticos próximos a las paredes de dicha tubería, como se observa en la Figura 3.10. También se aplicó a la superficie que representa el suelo del dominio.

- **Longitud de entrada en la chimenea**

En el estudio se buscó una longitud de entrada que permitiera al flujo llegar completamente desarrollado en la salida de la chimenea. Se utilizó la Ecuación 3.1 para estimar la longitud en régimen de flujo turbulento.

$$Le \approx d \cdot 4{,}4 \cdot Re_d^{1/6} \tag{3.1}$$

Siendo Re el número de Reynolds para el flujo y *d* el diámetro de la tubería. Para calcular el número de Reynolds se empleo la siguiente Ecuación:

$$Re = \frac{v \cdot D \cdot \rho}{\mu} \tag{3.2}$$

Se situó una línea horizontal a lo largo de la zona central de la tubería hasta su salida a la atmosfera con el objeto de graficar el perfil de velocidad que evidencie el comportamiento de la velocidad del flujo en esta trayectoria, como se muestra en la Figura 3.11, de tal forma que se pueda comparar con el valor teórico de la Ecuación 3.1.

### 3.1.2.2. Sensibilizado del mallado

La precisión de los resultados depende mucho del tamaño y disposición de las celdas computacionales en las distintas zonas del campo fluido. Para la malla computacional utilizada se comprobó la independencia que presentaban los resultados con respecto a la densidad del mallado utilizado.

Para ello, se construyeron tres (3) líneas sobre la zona donde los gases son expulsados a la atmosfera (Regenerador D-1 y Chimenea), con la finalidad de graficar los valores

de las concentraciones de uno de los elementos contaminantes como se observa en la Figura 3.12. Se realizaron simulaciones para las dos geometrías con diferentes densidades de malla.

Para la malla utilizada se estableció un error menor al 5 %, por lo tanto, se generó una gráfica con el Porcentaje de Error de la variable en estudio en función del número de elementos o densidad de la malla y se tomó el mallado con el menor número de elementos por debajo del porcentaje de error, debido a que este porcentaje es aceptable para la escogencia de una malla confiable.
Para controlar la densidad de la malla, se utilizó el parámetro GMS (Global Mesh Scaling). El cual permite el aumento o disminución del número de elementos triangulares, tetraédricos y piramidales en cada caso.

En la Tabla 3.5, se exponen las mallas que se usaron en cada geometría para llevar a cabo en análisis de sensibilizado, con la variación del GMS y el número de elementos que se generaron.

Tabla 3.5 Mallados para el sensibilizado.

Fuente: Propia, (2010)

| **Volumen de control 1** | | | **Volumen de control 2** | | |
|---|---|---|---|---|---|
| **Malla** | **GMS** | **# de elementos** | **Malla** | **GMS** | **# de elementos** |
| **1** | 0,75 | 1.340.882 | **1** | 0,75 | 1.451.565 |
| **2** | 0,7 | 1.507.353 | **2** | 0,7 | 1.668.696 |
| **3** | 0,65 | 1.717.050 | **3** | 0,65 | 1.935.908 |
| **4** | 0,625 | 1.859.346 | **4** | 0,625 | 2.104.557 |
| **5** | 0,6 | 2.011.366 | **5** | 0,615 | 2.177.074 |
| **6** | 0,58 | 2.155.048 | **6** | 0,6 | 2.293.284 |
| **7** | 0,55 | 2.416.442 | - | - | - |

### 3.2. Definición física

Se establecen las condiciones y propiedades que en la dinámica de fluido computacional permiten simular el comportamiento de los sistemas que implican flujo de fluido en el marco donde tienen lugar la operatividad del sistema. Esta fase se limita a ingresar las condiciones de borde que se definen en el pre-procesador.

#### 3.2.1. Condiciones operacionales

El proceso de Craqueo catalítico fluidizado posee la flexibilidad de trabajar en tres condiciones de operación:

- Flujo Máximo: 180.000 lb/h
- Flujo normal: 145.051 lb/h
- Flujo mínimo: 101.500 lb/h

Para llevar a cabo las simulaciones se precisó trabajar con el caso más desfavorable, de tal forma se escogió la condición de operación de flujo máximo. También se estableció que en el proceso de recuperación de finos de catalizador, el Separador de Cuarta Etapa (SCE) se encuentra fuera de operación, de allí que los gases expulsados a la atmosfera contengan todas las partículas de catalizador productos de la combustión.

A pesar de que el Separador de Tercera Etapa (STE) esté operativo, el proceso de separación que realiza es en vano, ya que por estar fuera de servicio el SCE las partículas que extrae el STE del gas vuelve a la corriente principal del proceso por medio de un by-pass, que aísla al SCE del proceso.

### 3.2.2. Condiciones del ambiente

Una alta temperatura, entre los 33 y 35 °C, en la zona de Puerto La Cruz, presentando un clima semiárido caracterizado por su sequedad, con un nivel de precipitaciones que fluctúa entre los 530 y 1400 mm al año.

#### 3.2.2.1. Comportamiento del viento

Para mostrar la información sobre las distribuciones de velocidades del viento y la frecuencia de variación de las direcciones del viento, se utilizó la llamada rosa de los vientos basándose en observaciones meteorológicas de las velocidades y direcciones del mismo, como se muestra en la Figura 3.13.

Por lo general los datos meteorológicos pueden variar de un año a otro (normalmente alrededor de un 10 por ciento). Por lo tanto, lo más conveniente es tener observaciones de varios años para poder obtener una media fidedigna. Sin embargo, dado que no se cuenta con una rosa del viento actualizada en esta investigación se utiliza la mostrada en la Figura 3.13. [23]

Las rosas del viento que se observan en la Figura 3.13 tienen un periodo de recolección de datos aproximadamente de 14 años, donde se observan los valores promediados de la magnitud y dirección de la velocidad del viento, representados por la barra negra. La barra blanca muestra la frecuencia con que se repite tanto la dirección como la magnitud del viento, para los 12 meses del año. Estos datos fueron suministrados por Pdvsa.

#### 3.2.2.2. Variación de la velocidad del viento con la altura

A una gran altura de la superficie del suelo, alrededor de un kilómetro, la superficie terrestre apenas ejerce influencia alguna sobre el viento. Sin embargo, en las capas más bajas de la atmósfera, las velocidades del viento se ven afectadas por la fricción con la superficie terrestre.

La velocidad del viento aumenta con la altura, como se observa en la Figura 3.14. La turbulencia atmosférica y la fricción con el suelo de las capas inferiores determinan la forma de esta variación, que puede expresarse por [23]:

$$V(z) = V_1 \frac{\ln\left(z/z_0\right)}{\ln\left(z_1/z_0\right)} \tag{3.3}$$

Donde:

V = velocidad del viento a una altura Z.

$V_1$ = velocidad del viento medida a una altura sobre el suelo $Z_1$.

$Z_0$ = medida del tamaño de los remolinos producidos por la rugosidad del terreno.

La ley de variación logarítmica ha sido estudiada en un gran número de observaciones experimentales y verificada su validez en condiciones atmosféricas de estabilidad neutral.

La rugosidad del terreno se caracteriza por un indicador conocido por altura de la rugosidad superficial. Se encuentra aerodinámicamente descrita en términos de una longitud de rugosidad $Z_0$ que caracteriza el tamaño y distribución de los obstáculos que están alrededor y sobre los cuales el viento debe soplar. En la Tabla 3.6 se representa las clases y longitudes de rugosidad de diferentes superficies con las descripciones de las zonas correspondientes.

Altura (m)

Tabla 3.6 Tipos de rugosidades del Terreno.

| Tipo de terreno | Característica | Valor de Zo (m) |
|---|---|---|
| **Llano** | Playa, océano, superficies arenosas | 0,0003 |
| **Abierto** | Hierba baja, aeropuertos, tierras de cultivos vacías | 0,030 |
| **Poco rugoso** | Hierba alta, cultivos bajos | 0,100 |
| **Rugoso** | Cultivos altos alineados, árboles bajos | 0,250 |
| **Muy rugoso** | Bosques naturales | 0,500 |
| **Cerrados** | Poblados, suburbios | > 1,000 |
| **Ciudades** | Centro de ciudades, espacios abiertos en bosques | > 2,000 |

### 3.2.3. Elementos contaminantes

En esta fase se crearon varios materiales (especies) con el fin de establecer un flujo multicomponente que refleja las concentraciones de cada uno de estos elementos producto de la combustión de hidrocarburos que emanan a la atmosfera.

Un fluido multicomponente contiene dos o más componentes y sus propiedades se calculan a partir de los elementos que lo constituyen. Los componentes que se supone estarán mezclados a nivel molecular y las propiedades del líquido, dependerán de la proporción de los mismos.

Los componentes pueden existir en fracciones de masa fija o en fracciones de masa variable. Para este proyecto se utilizó fracciones de masa variable, donde las proporciones de cada componente presente pueden variar en el espacio o el tiempo. Esto puede ser causado por la conversión de un componente a otro a través de una reacción química, como de combustión, impulsada por la difusión o la causada por especificar proporciones distintas en los distintos límites o en las condiciones iniciales.

Los gases de combustión están constituidos por los siguientes elementos con su respectiva fracción másica, como se muestra en la Tabla 3.7.

Tabla 3.7 Elementos contaminantes.

Fuente: PDVSA, (2010).

| Nombre | Nomenclatura | Fracción Másica |
|---|---|---|
| Monóxido de Carbono | CO | 0,0024 |
| Dióxido de Carbono | $CO_2$ | 0,2096 |
| Dióxido de Azufre | $SO_2$ | 0,0012 |
| Agua (vap.) | $H_2O$ | 0,0725 |
| Oxigeno | $O_2$ | 0,0194 |
| Nitrógeno | $N_2$ | 0,6949 |

### 3.3. Descripción del modelo final

El tipo de simulación que se escogió fue el de Estado Estable, con la turbulencia y la transferencia de calor. En estado estable las características del flujo no cambian con el tiempo y cuyas condiciones estables se supone que se ha llegado después de un intervalo de tiempo relativamente largo. Por lo tanto, no requieren información en tiempo real para describirlos. En el dominio se especificó una presión de referencia de una atmosfera (1 atm), de igual forma se consideraron los efectos gravitatorios.

El modelo de turbulencia utilizado es el de k-Epsilon, por ser el de uso más frecuente en aplicaciones industriales de ingeniería, y que ha sido validado para una gran variedad de flujos turbulentos.

Para la transferencia de calor se uso el modelo de Energía Térmica, este modela el transporte de entalpia por el dominio del fluido. Se diferencia del modelo de Energía Total por no incluir los efectos del promedio de la energía cinética del flujo. Por lo

tanto, reproduce los mismos resultados que el modelo Energía Total cuando los efectos de energía cinética desaparecen, resultando adecuado para flujos de baja velocidad donde los efectos cinética son despreciables. El modelo de Energía Total es usado cuando el número de Mach excede 0,2 en el flujo de un gas, el cual no se cumplió en este estudio.

La fase continúa del modelo está representada por los gases de combustión expulsados por la chimenea y el aire que representa el comportamiento del viento, dichas características se muestra en la Tabla 3.8:

Tabla 3.8 Características de los elementos contaminantes.

Fuente: PDVSA, (2010).

| PROPIEDADES | CO | $CO_2$ | $H_2O$ | $N_2$ | $O_2$ | $SO_2$ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| **Masa Molar (g/mol)** | 28,01 | 44,01 | 18,02 | 28,01 | 31,99 | 64,06 |
| **Densidad ($kg/m^3$)** | 1,184 | 1,87 | 598 | 1,185 | 1,354 | 2,77 |
| **Coeficiente de calor especifico (J/kg.k)** | 1039 | 850 | 2080,1 | 1042 | 918 | 622 |
| **Presión de Referencia (atm)** | 1 | 850 | 1,014 (bar) | 1042 | 918 | 622 |
| **Temperatura de Referencia ºC** | 25 | 100 C | 1,014 | 1042 | 918 | 622 |
| **Viscosidad dinámica (Pa.s)** | $1,66x10^{-5}$ | $1,37x10^{-5}$ | $9,4x10^{-6}$ | $1,65x10^{-5}$ | $1,9x10^{-5}$ | $1,15x10^{-5}$ |
| **Conductividad Térmica (w/m.k)** | 0,023 | 0,0146 | 0,0193 | 0,024 | 0,0242 | 0,0055 |
| **Expansión Térmica ($k^{-1}$)** | 0,00366 | 0,00366 | 0,00366 | 0,024 | 0,0242 | 0,0055 |

En cuanto a la fase dispersa, esta se encuentra representada por los finos de catalizador que viajan a través de los gases de combustión, este catalizador es un compuesto de sílice-alúmina, con una densidad 1439,77 kg / $m^3$.

El tamaño de estos finos de catalizador fueron seleccionados de la hoja de datos de los gases de la chimenea proporcionado por Kellogs Brown & Root, Inc. Estas

partículas tienen un tamaño de 1 a 6 micrones, donde el mayor porcentaje de partículas están representadas por las más pequeñas como se puede observar en la Figura 3.15.

El fluido afecta el movimiento de las partículas a través del arrastre viscoso y la diferencia de velocidad entre la partícula y el fluido. Por otra parte, hay una influencia para contrarrestar el flujo por parte de las partículas al fluido, debido a la fricción viscosa. Este efecto se denomina acoplamiento entre las fases. Para modelar el comportamiento de las partículas se utilizó un acoplamiento de un solo sentido (one-way coupling) debido a que el fluido tiene una importante influencia sobre las partículas, mientras que la influencia de estas sobre el fluido es insignificante, como se demostrará en el siguiente Capítulo con el cálculo del Número de Stokes. La fuerza de arrastre se simuló con el método de Schiller-Naumann, este modelo se puede utilizar solo para partículas sólidas esféricas, o partículas lo suficientemente pequeñas que pueden ser consideradas esféricas.

### 3.3.1. Condiciones de frontera.

Las condiciones de contorno son especificaciones de las propiedades o condiciones en la superficie del dominio y son requeridas para definir completamente la simulación de un flujo. Las condiciones de contornos impuestas en el dominio de estudio son las siguientes:

#### 3.3.1.1. Entrada (Inlet)

Para este estudio se especificaron dos contornos de entrada que se describen a continuación:

- **Chimenea**

En este contorno se especifico la velocidad de entrada al dominio de los gases de combustión, establecida en 32,921 m/s para el caso actual, mientras que para el caso propuesto fue de 14,691 m/s con una temperatura de 1345 Kelvin para ambos casos. Estos valores se obtuvieron del proyecto KBR: J-7750-10. Se definió una intensidad de turbulencia de 5 %, valor recomendado por el programa de CFD cuando no se conocen los parámetros de turbulencia en la entrada.

Conjuntamente con los gases de combustión se incorporó la inyección de los finos de catalizador con un caudal másico de 0,00982783 kg/s. El número de partículas fueron supuestas debido a que no se poseía información referente al número de partículas que salen de la chimenea, hay que recordar que en el modelo las partículas es una muestra representativa de las partículas reales de tal forma que el número de partículas del modelo será mucho menor que el número real de las partículas, de tal forma, se especificó un numero de partícula igual a 5000. Para dar a las partículas la misma velocidad de la fase continua se seleccionó la opción de Velocidad de Cero Deslizamiento (Zero Slipe Velocity) y una inyección uniforme, el cual produce una inyección aleatoria de las partículas.

- **Viento**

Se simuló el viento a una temperatura de 305 K. Así mismo, para especificar las condiciones del viento se tomaron algunas consideraciones: inicialmente, es que la velocidad del viento se mantiene constante, es decir, no presenta fluctuaciones, como en el caso real; así mismo, para el caso actual, se especificaron 12 velocidades del viento con su respectiva dirección tomando en cuenta las rosas del viento como se

muestra en la Tabla 3.9. Para el caso propuesto, se especificaron 3 condiciones por mes, una velocidad alta, media y baja, como se muestra en la Tabla 3.10.

En este caso la intensidad de turbulencia no puede ser definida igual como para el caso de la chimenea debido que esa condición aplica solo para flujos en tuberías. De tal forma que para los flujos externos, y en ausencia de perfiles detallados experimentales de $k$ y ε, se pueden tomar los siguientes pasos para llegar a estimaciones razonables de las escalas características $k$ y ε. [24].

En primer lugar se requiere una escala de velocidad característica del flujo medio, llamado $u_\infty$ que es la velocidad de flujo libre. El valor característico de $k$ se puede obtener de la siguiente Ecuación [24]:

$$k = a u_\infty^{\,2} \tag{3.4}$$

Donde a es un coeficiente adimensional (la intensidad de la turbulencia) que asume el siguiente rango de valores [24]:

$$a \begin{cases} (0,1) & ;\ \text{free-shear flows (wakes jets, etc.)} \\ (0 \sim 0.001) & ;\ \text{shear – free flows} \end{cases}$$

Tabla 3.9 Velocidad (m/s) y dirección del viento para el caso actual.

Fuente: Propia, (2010).

| enero | febrero | marzo | abril | mayo | junio | julio | agosto | sep. | octubre | nov. | dic. |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 4 ; SE | 8 ; N | 14 NE | 6 ; N | 3 ; SE | 9 ; SO | 1 ; N | 3 ; E | 2 ; NO | 8 ; SE | 4 ; SO | 1 ; NO |



Tabla 3.10 Velocidad (m/s) y dirección del viento para el caso propuesto.

Fuente: Propia, (2010).

| | enero | febrero | Marzo | abril | mayo | junio | julio | Agosto | sep. | octubre | nov. | dic. |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| **Alto** | 12 ; NE | 12 ; NE | 14 ; NE | 8 ; NE | 6 ; NE | 9 ; SO | 8 ; SE | 4 ; SE | 8 ; SE | 8 ; SE | 8 ; SE | 7 ; SE |
| **medio** | 6 ; N | 8 ; N | 4 ; N | 6 ; N | 3 ; SE | 4 ; SE | 4 ; E | 3 ; E | 3 ; E | 3 ; E | 4 ; SO | 6 ; NE |
| **Bajo** | 4 ; SE | 2 ; ENE | ** | 1 ; ENE | 2 ; ENE | 1 ; N | 1 ; N | 1 ; NE | 2 ; NO | 1 ; N | 1 ; NE | 1 ; NO |

En el segundo caso, donde no es disponible la escala de longitud característica del caudal medio o los campos turbulencia, la siguiente Ecuación se puede emplear para llegar a un valor característico de ε.

$$\varepsilon = \rho \cdot C_{\mu} \cdot \frac{k^2}{R_{\mu} \cdot \mu} \tag{3.5}$$

Donde $R_\mu = \mu_t / \mu$ es la relación entre la viscosidad laminar y turbulenta. $R_\mu$ puede variar considerablemente de un problema de flujo a otro. Sin embargo, para la mayoría de los problemas se puede obtener un valor razonable de $R_\mu$ después de varios ensayos y error. Por ejemplo, para el flujo libre de cizallamiento con muy bajos niveles de turbulencia $R_\mu \sim 1$. Para flujos más típico este valor está entre $R_\mu \sim 10^1 \sim 10^2$. y $C\mu$ es una constante del modelo de Turbulencia $k$-$\varepsilon$ y su valor es igual a 0,09 [24].

### 3.3.1.2. Salida (outlet)

Para el contorno de salida, las condiciones de borde fueron nombradas atmosfera, utilizando el promedio de Presión Estática, donde la presión relativa tomada fue de 0 atm.

### 3.3.1.3. Pared (wall)

Para este contorno la opción tomada para la influencia de la pared en el fluido fue la de no desplazamiento, de tal forma, la velocidad próxima a la pared, asume la velocidad de la misma, que es cero por defecto. No se consideró la rugosidad de las paredes.

### 3.3. Criterio de Convergencia

En este proyecto se considera como criterio de convergencia la norma RMS con un nivel o límite residual de $1x10^{-4}$, el cual es considerado como un nivel recomendado por el programa de CFD.

# CAPÍTULO IV

# RESULTADOS Y ANÁLISIS

Al analizar la dispersión de elementos contaminantes expulsados a través de la nueva chimenea del proyecto de Reducción de Emisiones de Catalizador en UFCC, que desarrolla PDVSA en la Refinería Puerto La Cruz, Estado Anzoátegui, se expone lo siguiente:

## 4.1. Análisis de sensibilidad del mallado

A objeto de determinar el mallado mas óptimo, se tomaron tres (3) líneas sobre la chimenea posicionadas a 25, 27,5 y 30 metros respectivamente, justo a la salida de los gases y de misma longitud, con lo que se permitió tomar datos de concentración de $CO_2$, como se puede observar en las Figuras 4.1, 4.2 y 4.3.

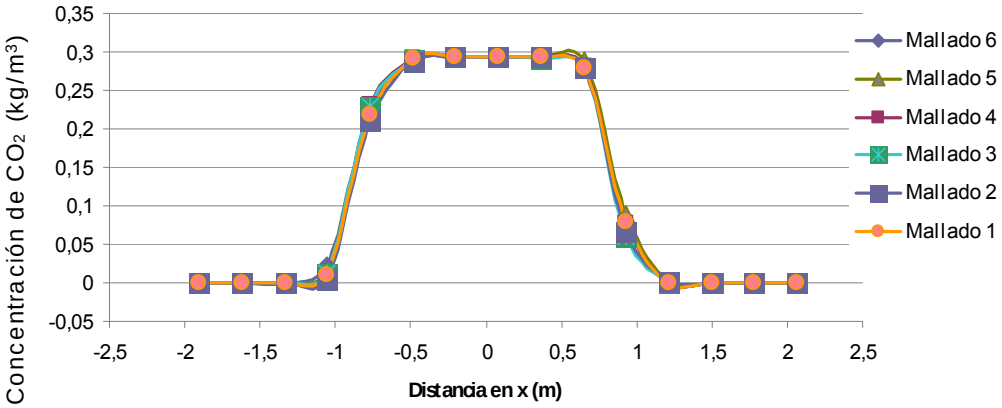


Figura 4.1 Perfil de concentración de $CO_2$ en la línea 1.

Fuente: Propia, (2010).

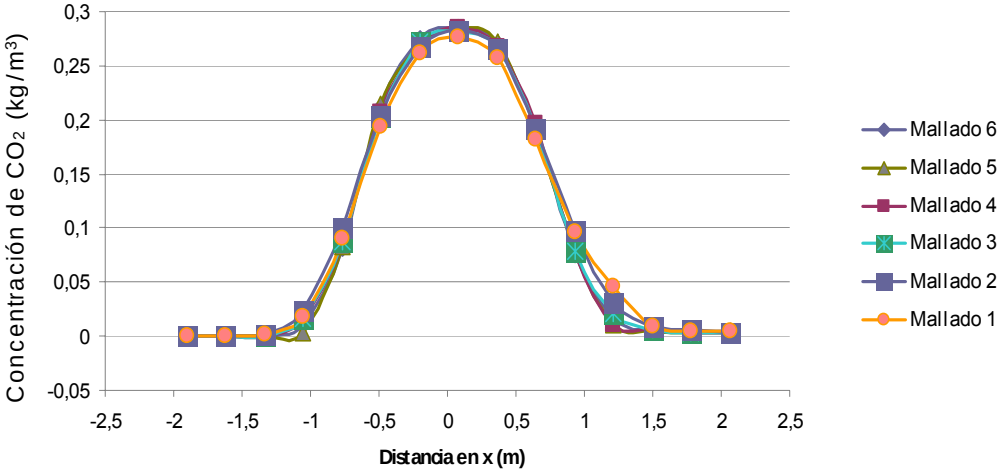


Figura 4.2 Perfil de concentración de $CO_2$ en la línea 2.

Fuente: Propia, (2010).

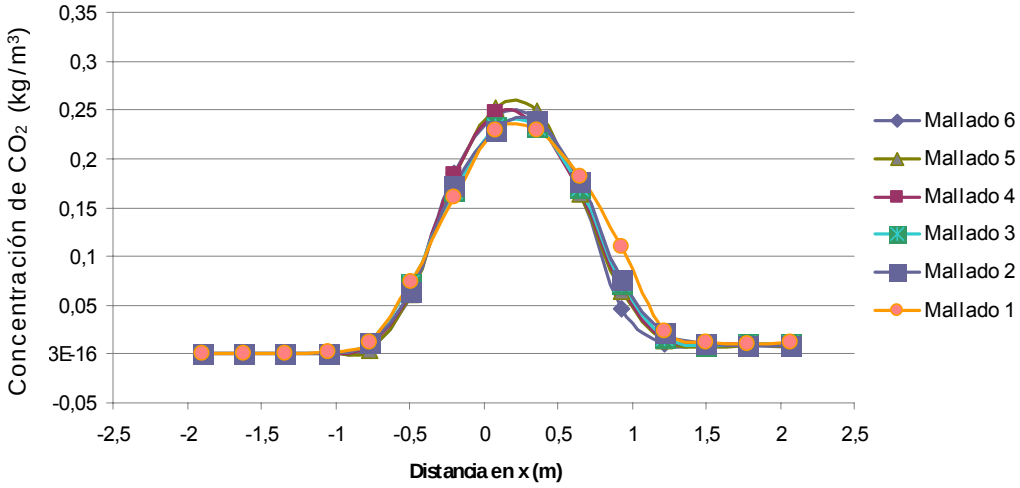


Figura 4.3 Perfil de concentración de $CO_2$ en la línea 3.

Fuente: Propia, (2010).

Los resultados obtenidos, en estas figuras demuestran que a pesar de variar la densidad del mallado comprendido entre el 1 y 6 mantiene entre si un

comportamiento característico, en cuanto a los niveles de concentración de $CO_2$, revelando la independencia de cada uno de los mallados a la hora de arrojar los resultados. No obstante estas pequeñas variaciones que se observan en las figuras, al momento de calcular el porcentaje (%) de error, con respecto el mallado más denso los datos obtenidos son los que se demuestran en las Tablas 4.1, 4.2 y 4.3.

Tabla 4.1 Porcentaje de error para la Línea 1.

Fuente: Propia, (2010).

| X | mallado 5 | mallado 4 | mallado 3 | mallado 2 | mallado 1 |
|---|---|---|---|---|---|
| **-1,90274** | 24 % | 71 % | 51 % | 92 % | 68 % |
| **-1,61928** | 75 % | 1237 % | 676 % | 528 % | 44 % |
| **-1,33582** | 3391 % | 1431 % | 176 % | 369 % | 1080 % |
| **-1,05236** | 37 % | 61 % | 52 % | 81 % | 1 % |
| **-0,768905** | 2 % | 4 % | 3 % | 5 % | 167 % |
| **-0,485447** | 0 % | 0 % | 1 % | 1 % | 38 % |
| **-0,201988** | 0 % | 0 % | 0 % | 0 % | 7 % |
| **0,08147** | 0 % | 0 % | 0 % | 0 % | 3 % |
| **0,364928** | 0 % | 0 % | 0 % | 0 % | 8 % |
| **0,648387** | 3 % | 0 % | 1 % | 1 % | 45 % |
| **0,931845** | 14 % | 3 % | 23 % | 14 % | 5 % |
| **1,2153** | 437 % | 19 % | 68 % | 378 % | 97 % |
| **1,49876** | 24 % | 18 % | 191 % | 86 % | 99 % |
| **1,78222** | 71 % | 77 % | 157 % | 58 % | 99 % |
| **2,06568** | 30 % | 15 % | 0 % | 75 % | 99 % |

Tabla 4.2 Porcentaje de error para la Línea 2.

Fuente: Propia, (2010).

| X | mallado 5 | mallado 4 | mallado 3 | mallado 2 | mallado 1 |
|---|---|---|---|---|---|
| **-1,90274** | 116 % | 717 % | 283 % | 420 % | 536 % |
| **-1,61928** | 1136 % | 331 % | 570 % | 33088 % | 151009 % |
| **-1,33582** | 4453 % | 1325 % | 1574 % | 128307 % | 127021 % |
| **-1,05236** | 64 % | 38 % | 58 % | 122 % | 75 % |
| **-0,768905** | 1 % | 4 % | 7 % | 23 % | 11 % |
| **-0,485447** | 1 % | 2 % | 5 % | 4 % | 8 % |

Tabla 4.2.: Porcentaje de error para la Línea 2 (continuación).

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| **-0,201988** | 2 % | 2 % | 1 % | 2 % | 5 % |
| **0,08147** | 0 % | 0 % | 1 % | 1 % | 3 % |
| **0,364928** | 0 % | 1 % | 2 % | 2 % | 5 % |
| **0,648387** | 0 % | 3 % | 0 % | 0 % | 5 % |
| **0,931845** | 0 % | 1 % | 3 % | 28 % | 27 % |
| **1,2153** | 33 % | 31 % | 30 % | 95 % | 184 % |
| **1,49876** | 12 % | 39 % | 47 % | 106 % | 125 % |
| **1,78222** | 13 % | 23 % | 11 % | 33 % | 20% |
| **2,06568** | 17 % | 31 % | 18 % | 10 % | 3 % |

Tabla 4.3 Porcentaje de error para la Línea 3.

Fuente: Propia, (2010).

| X | mallado 5 | mallado 4 | mallado 3 | mallado 2 | mallado 1 |
|---|---|---|---|---|---|
| **-1,90274** | 99 % | 152 % | 99 % | 1099 % | 834 % |
| **-1,61928** | 38 % | 58 % | 95 % | 115 % | 211 % |
| **-1,33582** | 63 % | 60 % | 74 % | 425 % | 700 % |
| **-1,05236** | 100 % | 90 % | 39 % | 20 % | 269 % |
| **-0,768905** | 30 % | 84 % | 128 % | 142 % | 151 % |
| **-0,485447** | 0 % | 4 % | 20 % | 6 % | 21 % |
| **-0,201988** | 2 % | 1 % | 10 % | 7 % | 14 % |
| **0,08147** | 4 % | 2 % | 4 % | 6 % | 6 % |
| **0,364928** | 3 % | 3 % | 3 % | 1 % | 5 % |
| **0,648387** | 1 % | 1 % | 3 % | 7 % | 10 % |
| **0,931845** | 36 % | 44 % | 56 % | 60 % | 137 % |
| **1,2153** | 26 % | 39 % | 60 % | 98 % | 114 % |
| **1,49876** | 16 % | 13 % | 4 % | 9 % | 31 % |
| **1,78222** | 8 % | 15 % | 11 % | 3 % | 15 % |
| **2,06568** | 11 % | 53 % | 49 % | 31 % | 68 % |

Se puede observar que los porcentajes que recogen las tablas, el margen de error tanto al inicio como al final de la línea es alto, mientras que los porcentajes de error esperados, se encuentran agrupadas en el centro de las líneas. Sin embargo, cuando se

realiza una comparación entre los valores de los perfiles de concentración y los porcentajes de error, se observa que en las gráficas de cada una de las mallas se superponen los valores en los extremos de la curva (inicio y final de la línea), y es en estas donde se encuentran los mayores porcentajes de error. En vista que al comparar valores muy pequeños, que se aproximan a cero, en el orden de los $10^{-16}$, la menor diferencia tiende a crear un gran margen de error. Toda vez que los resultados para el caso propuesto no fueron los esperado no se repite el proceso para el caso actual, ante ello se decidió realizar una comparación adicional.

Consecuentemente, se toma ahora como variable la velocidad que se localiza sobre la chimenea, lugar donde interactúan tanto la velocidad del viento como la de los gases expulsados por la misma, se traza una línea, para ambos casos. El respectivo análisis se hizo sin ninguna simplificación, para el caso actual se tomaron las condiciones del mes de febrero con una velocidad del viento de 8 m/s en dirección Norte, mientras que para el caso propuesto se tomaron las condiciones del mes de febrero con una velocidad de 2 m/s (baja velocidad) en dirección Estenoreste.

Para el caso actual se trazó una línea a la altura de 64 metros y para el caso propuesto se trazó una línea a una altura de 40 metros como se muestra en la Figura 4.4.

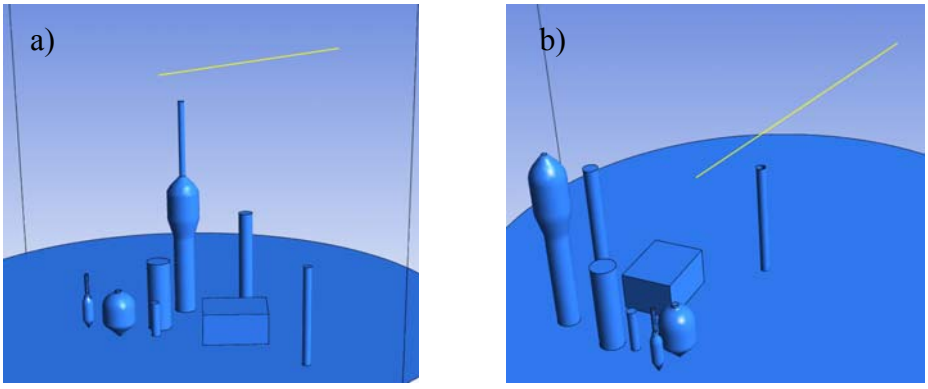


Figura 4.4 a) Línea de estudio para el caso actual., b) Línea de estudio para el caso propuesto.
Fuente: Programa de CFD, (2010).

En esta línea se establecieron 15 puntos donde fueron tomados los datos de la variable velocidad para cada una de las diferentes densidades de malla, obteniéndose para este caso los resultados representados en la Figura 4.5 y 4.6.

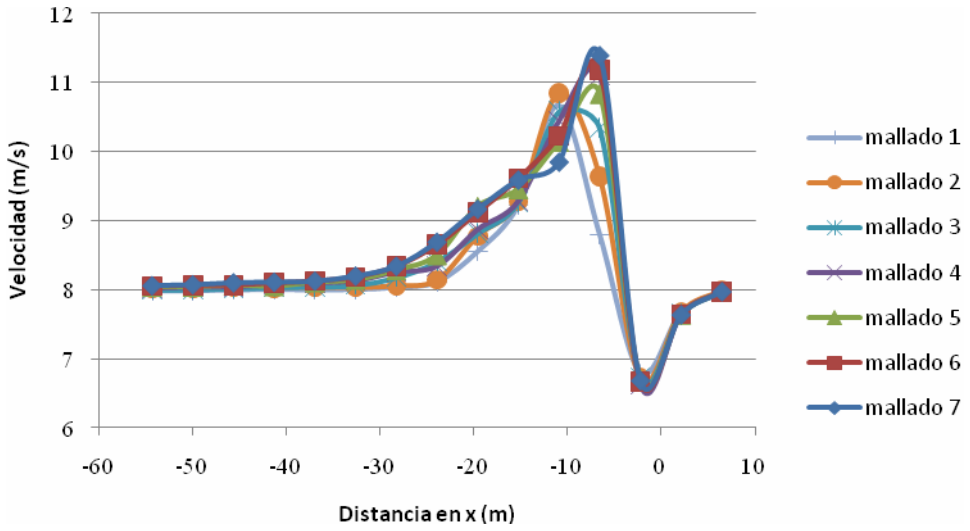


Figura 4.5 Curvas de velocidad para el caso actual.

Fuente: Propia, (2010).

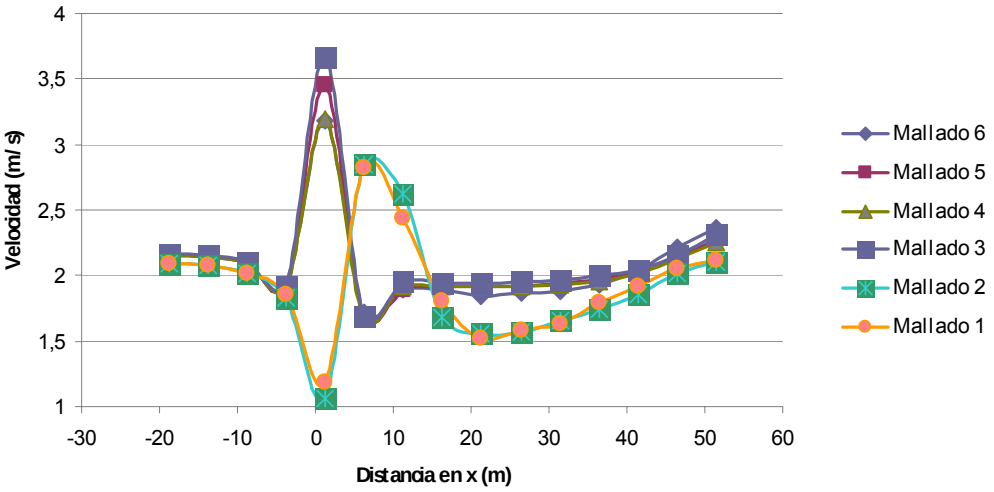


Figura 4.6 Curvas de velocidad para el caso propuesto.

Fuente: Propia, (2010).

Al igual que las curvas de concentraciones, las de velocidad también demuestran su independencia de resultados para cada uno de los mallados, como se aprecia en la Figura 4.5 arrojando valores muy similares entre ellos, hallándose algunas prácticamente superpuestas.

Pero en la Figura 4.6 para los mallados 1 y 2, los valores muestran discrepancia significativa en comparación con el más denso. Este comportamiento se debe a que el mallado no es lo suficientemente denso como para representar los picos reales de velocidad. Sin embargo, a los fines del estudio por haberse observado la mayor discrepancia en los primeros mallado (1 y 2) el sensibilizado se llevó a cabo considerando los resultados de los mallados restante, por tener un comportamiento similar al más denso.

Para la selección de la malla las Figuras 4.7 y 4.8 muestran las graficas de las curvas de porcentaje de error en relación al mallado más denso, estableciéndose de esta forma el criterio de mantener un porcentaje igual o por debajo del 5%. Esto permite que se pueda llevar a cabo el desarrollo computacional con un número de elemento menor que arroje resultados aproximados a los de malla más densa, pero a un menor costo computacional.

Los mallados seleccionados para los dos volúmenes de control fueron:

- Caso actual: Mallado 6 con 2.155.048 elementos
- Caso propuesto: Mallado 4 con 2.104.557 elementos

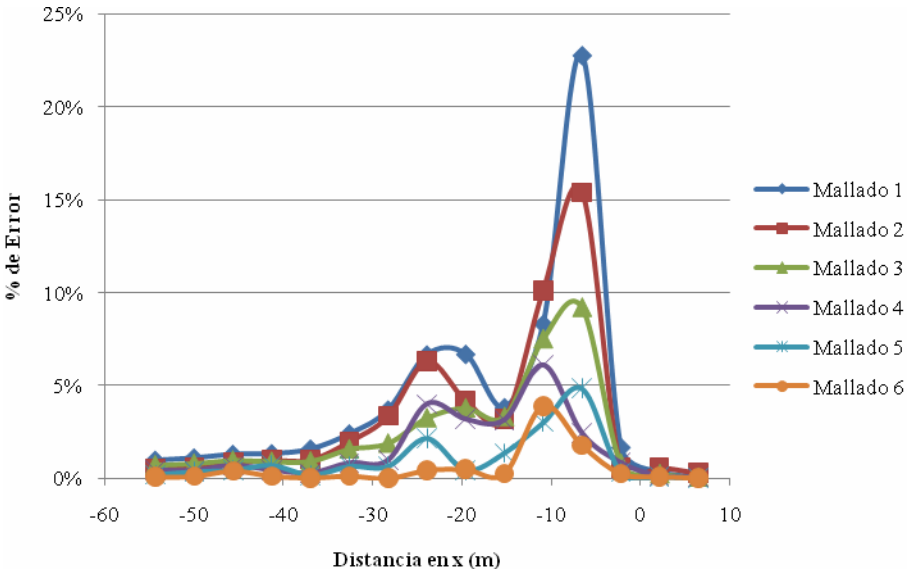


Figura 4.7 Porcentaje de error para el caso actual.

Fuente: Propia, (2010).

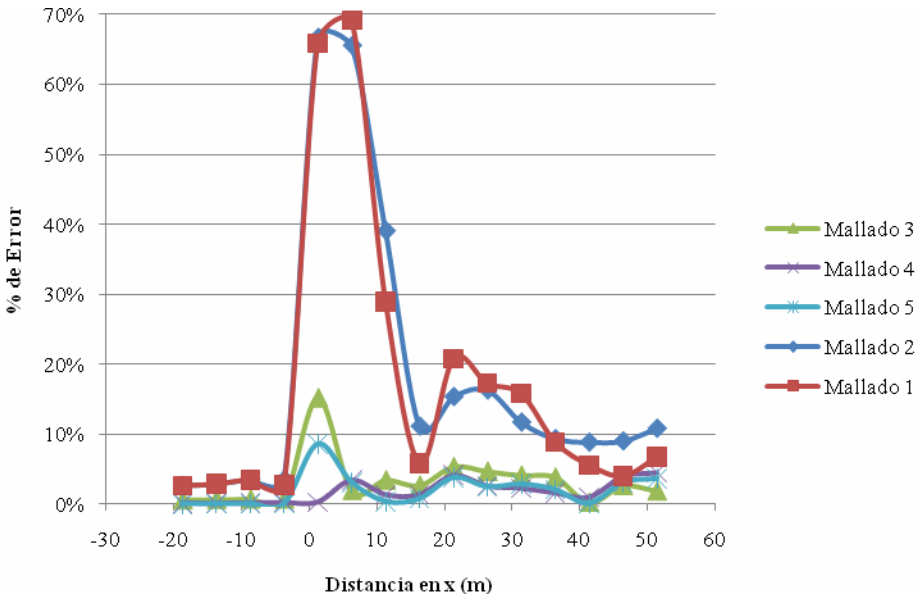


Figura 4.8 Porcentaje de error para el caso propuesto.

Fuente: Propia, (2010).

## 4.2. Longitud de entrada de la chimenea

Para este paso se resolvieron las ecuaciones 3.1 y 3.2 expresando los resultados en la Tabla 4.4.

Tabla 4.4 Resultados de las ecuaciones de Longitud Equivalente.

Fuente: Propia, (2010).

| Datos | Caso actual | Caso propuesto |
|---|---|---|
| **Numero de Reynolds** | 657.057,1644 | 375.560,724 |
| **Longitud Equivalente** | 58,50 m | 68,244 m |

Por lo tanto se consideró una prolongación de la entrada de la chimenea de unos 124 m aproximadamente para ambos volúmenes de control. Las siguientes gráficas representan el perfil de velocidad que demuestra el comportamiento de la velocidad del fluido en la zona central de la tubería.

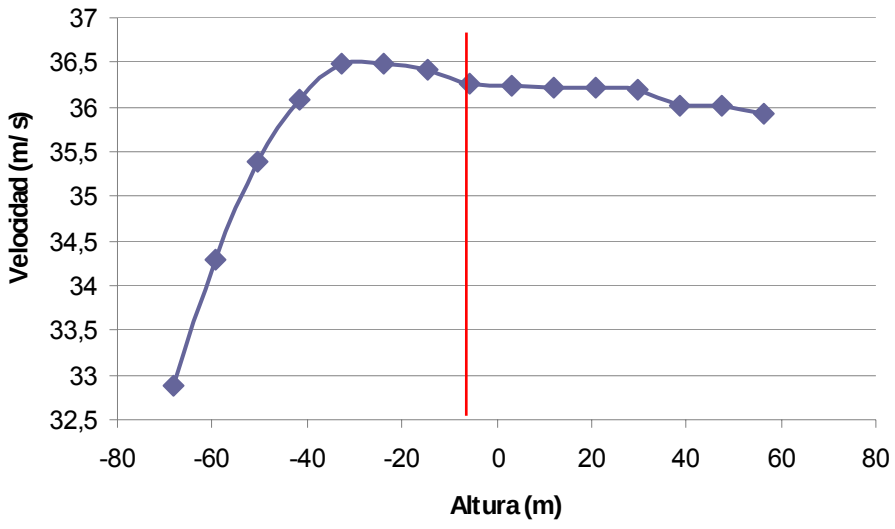


Figura 4.9 Perfil de velocidad para el caso actual.

Fuente: Propia, (2010).

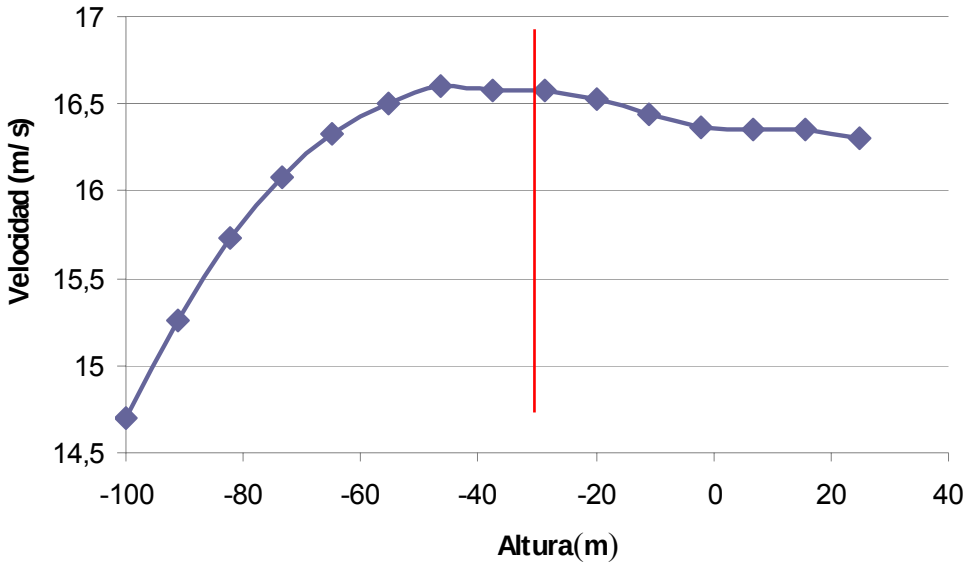


Figura 4.10 Perfil de velocidad para el caso propuesto.

Fuente: Propia, (2010).

Como se pueden observar ambas gráficas tienen un comportamiento similar. Por consiguiente esto significa que a partir de la entrada de la tubería la velocidad del fluido tiene un comportamiento ascendente hasta llegar a un punto donde el flujo logra desarrollarse completamente. Para el caso actual (Figura 4.9) se obtuvo un valor de longitud de entrada de 48 m aproximadamente mientras que para el caso propuesto (Figura 4.10) la longitud de estrada resultó a 55 m.

Se puede constatar que los valores experimentales se acercan a los valores teóricos, representado por la línea roja en cada una de las figuras anteriores, una de las posibles causas de esta diferencia se deba a que se asumen hipótesis o simplificaciones que no se tomaron en cuenta para este estudio, las cuales se basan en una velocidad que empieza a desarrollarse lentamente y en cambio para las simulaciones se ingresa la velocidad ya desarrollada. Sin embargo se mantiene la relación donde a un mayor número de Reynolds, la longitud de entrada es relativamente más corta.

Siguiendo con las gráficas una vez que se llega al punto donde el fluido logre desarrollarse este empieza a descender con pequeñas perturbaciones hasta llegar a la estabilidad, la cual se ve perturbada nuevamente cerca de la salida del conducto. Este comportamiento puede ser causado por estar próximo a la zona de descarga hacia la atmosfera donde se crean efectos turbulentos considerables.

Resultó significante para el estudio la implementación de una longitud de entrada en la chimenea pues gracias a la misma se logró una más rápida convergencia de las iteraciones en todos los casos. Anteriormente se habían realizado simulaciones sin longitud de entrada, las cuales no llegaron a converger.

### 4.3. Selección del rango para el cálculo de flujos externos

En este caso se realizaron dos simulaciones adicionales, tomando en cuenta valores altos y bajos dentro del rango de valores de a y $R_\mu$, las simulaciones se llevaron a cabo con condiciones de bordes que representan el mes de junio, con una velocidad de 9 m/s y una dirección del viento noroeste (NO) para el caso actual. Cabe destacar que estas condiciones fueron tomadas al azar, variándose los que se presentan en la Tabla 4.5:

Tabla 4.5 Datos de $k$ y $\varepsilon$.

Fuente: Propia, (2010).

| **Simulación 1 (bajos)** | | **Simulación 2 (altos)** | |
|---|---|---|---|
| a = 0,0001 | $k$ = 0,0081 $m^2/s^2$ | a = 0,001 | $k$ = 0,081 $m^2/s^2$ |
| $R_\mu$ = 10 | $\boldsymbol{\varepsilon}$ = 0,0382 $m^2/s^3$ | $R_\mu$ = 100 | $\boldsymbol{\varepsilon}$ = 0,382 $m^2/s^3$ |

Para comparar los obtenidos altos y bajos resultados se trazó una línea sobre la chimenea de la misma forma como se hizo el estudio de sensibilidad tomando como variable la velocidad, tal como se muestra en la Figura 4.11.

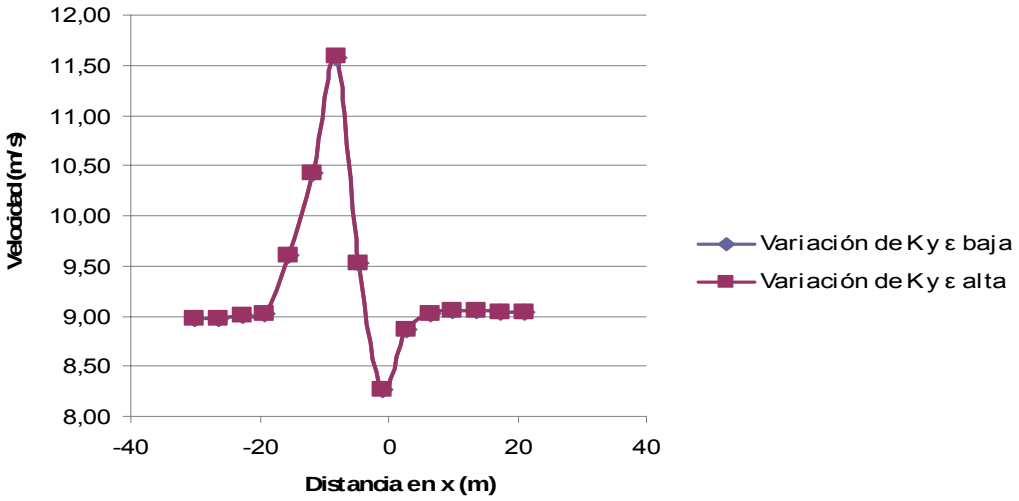


Figura 4.11 Perfil de velocidad para ambas condiciones.

Fuente: Propia, (2010).

Habiendo tomado los valores extremos de los rangos establecidos para las constantes a y $R_{\mu}$, los resultados obtenidos fueron muy parecidos como se observa en la Figura 4.11. Los perfiles de velocidades muestran un comportamiento similar sin variaciones entre ellas, de tal forma que se solapan uno a otro. Por tal motivo se estableció una media de estos rangos para realizar las simulaciones es este estudio.

### 4.4. Influencia de las partículas sobre el fluido

Se determina a partir del número de Stokes, definido como el número adimensional que caracteriza el comportamiento de las partículas suspendidas en un flujo, este parámetro permite conocer si las partículas tendrían alguna influencia

sobre el fluido. El número Stokes calculado por la Ec. 2.13 arrojó un resultado de 0,00361, tomando del diámetro de partícula mas grande (6 micrones), cumpliendo de

esta forma con el parámetro Stv << 1 implica que la partícula responde rápidamente a los cambios de velocidad del fluido, por lo tanto, no tendrá influencia alguna sobre el fluido. De igual forma este resultado entra en el rango establecido por [25], donde, las partículas mayores de 1 μm, pero menores de 20 μm, tienden a seguir el movimiento del gas portador, mientras que las partículas mayores de 20 μm poseen velocidades de sedimentación significativas y, por tanto, el aire las arrastra durante cortos períodos de tiempo.

### 4.5. Análisis de dispersión

Los resultados obtenidos en torno a la variación de las condiciones de fronteras para cada uno de los volúmenes de control, asociados a la dispersión de los gases contaminantes emanados de la chimenea se describen a continuación

#### 4.5.1. Comportamiento de los gases expulsados a la atmosfera

En ese sentido al entablar una comparación cualitativa entre los volúmenes de control 1 (caso actual) y 2 (caso propuesto), la Figura 4.12 presentan una muestra de algunos meses donde se puede observar el comportamiento de la pluma.

A partir de un análisis cualitativo, a través de las diferentes simulaciones hechas se destaca como la velocidad así como la dirección del viento variaron, sin embargo, algunos resultados, a pesar de guardar semejanza, se apreció diferencias en cuanto a la dirección del viento.

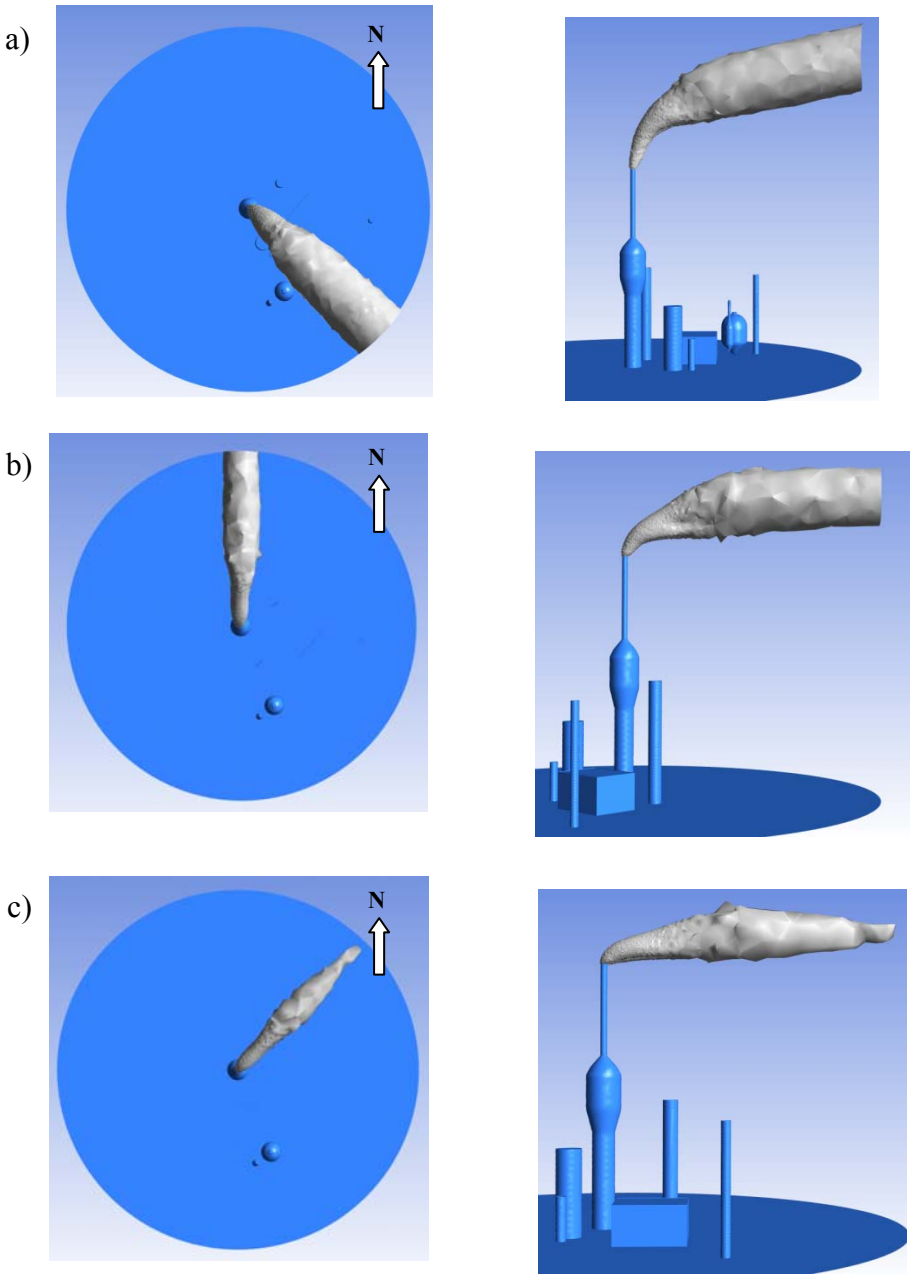


Figura 4.12 Comportamiento de la pluma de los gases de combustión para el caso actual

Continuación

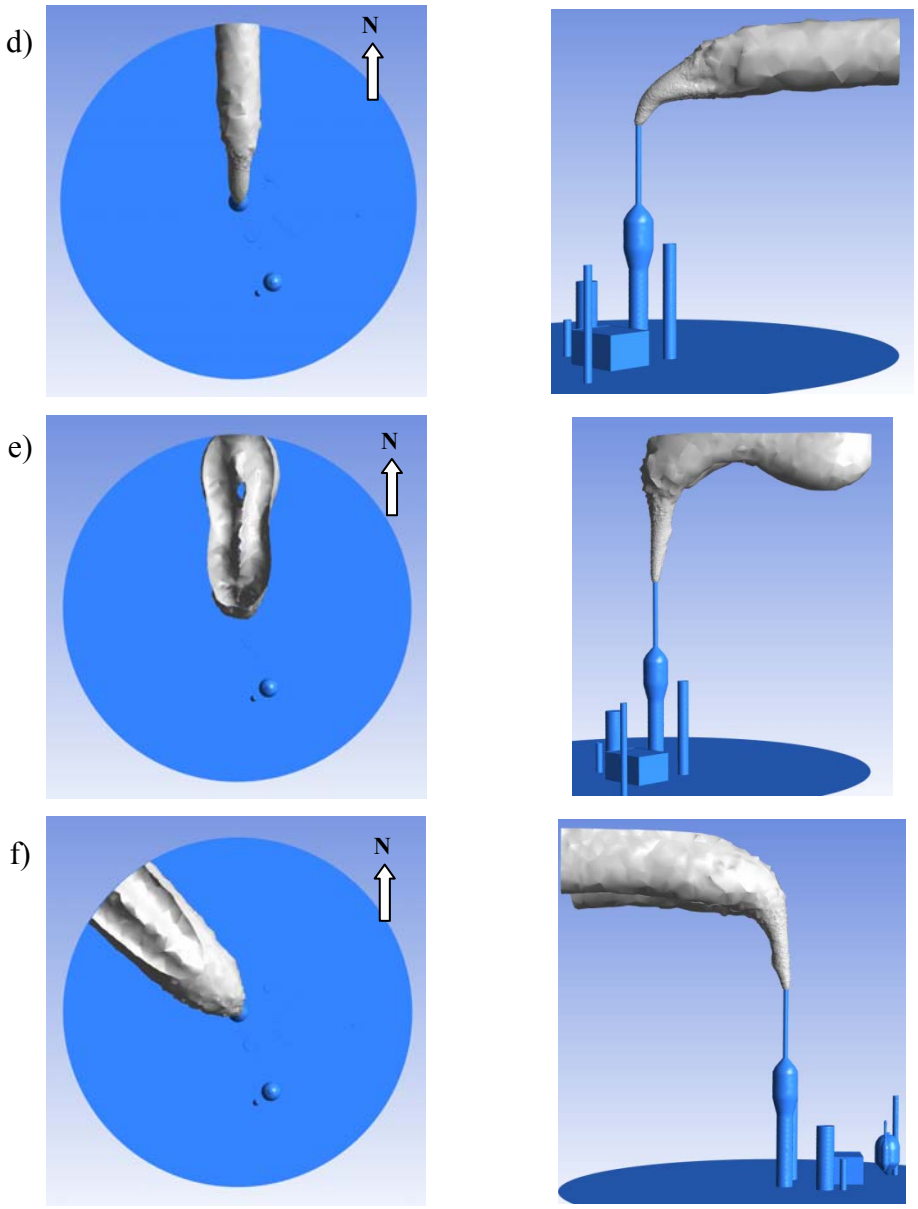


Figura 4.12 Comportamiento de la pluma de los gases de combustión para el caso actual

Fuente: Propia, (2010).

En la Figura 4.12 se muestra la vista de planta y de perfil de los meses muestreados donde a) representa las condiciones del mes de enero (v = 4 m/s, SE), b) condiciones

del mes de febrero (v = 8 m/s, N), c) condiciones del mes de marzo (v = 14 m/s, NE), d) condiciones del mes de abril (v = 6 m/s, NE), e) condiciones del mes de julio (v = 1 m/s, N) y f) condiciones del mes de septiembre (v = 2 m/s, NO).

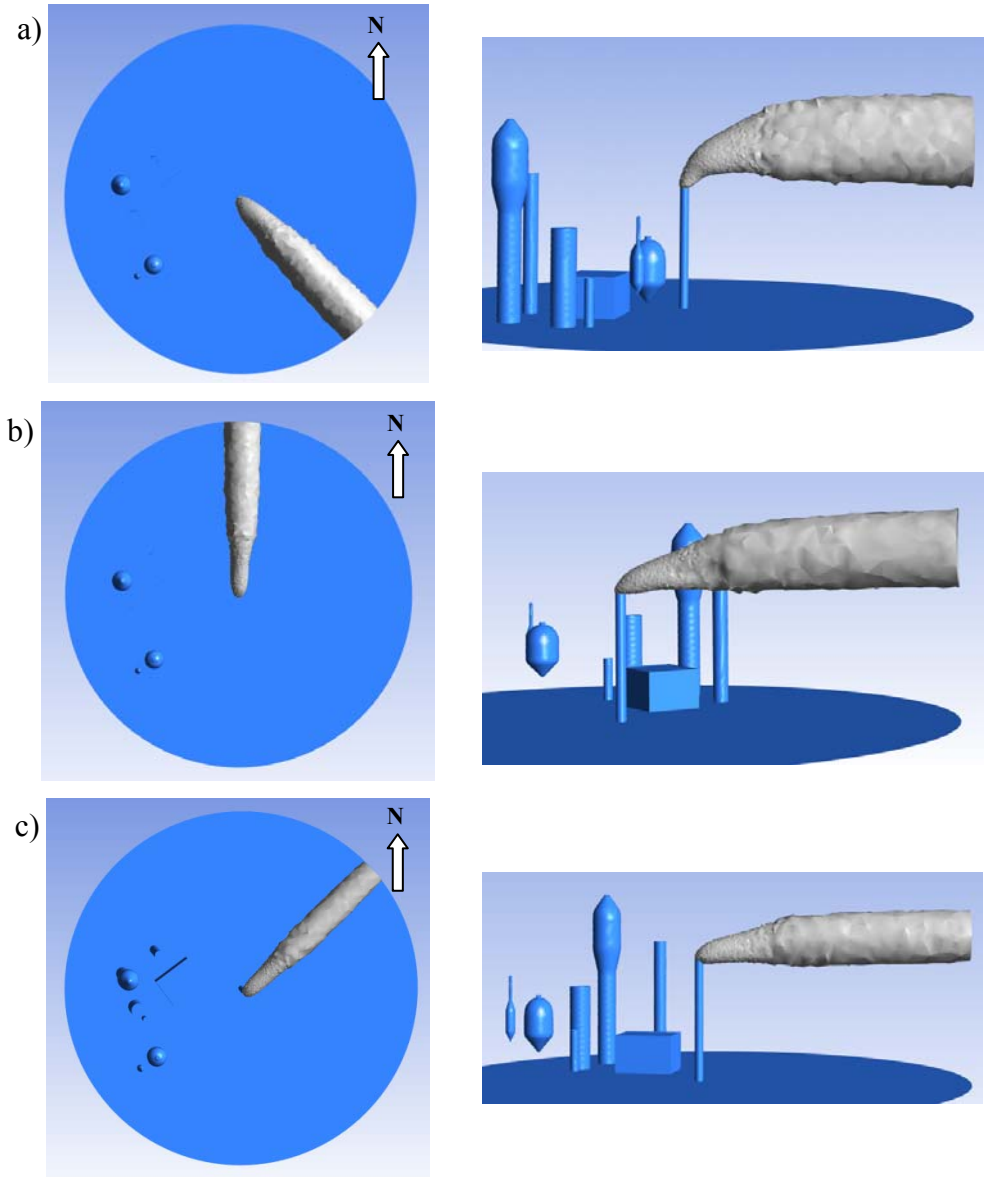


Figura 4.13 Comportamiento de la pluma de los gases de combustión para el caso actual

Continuación

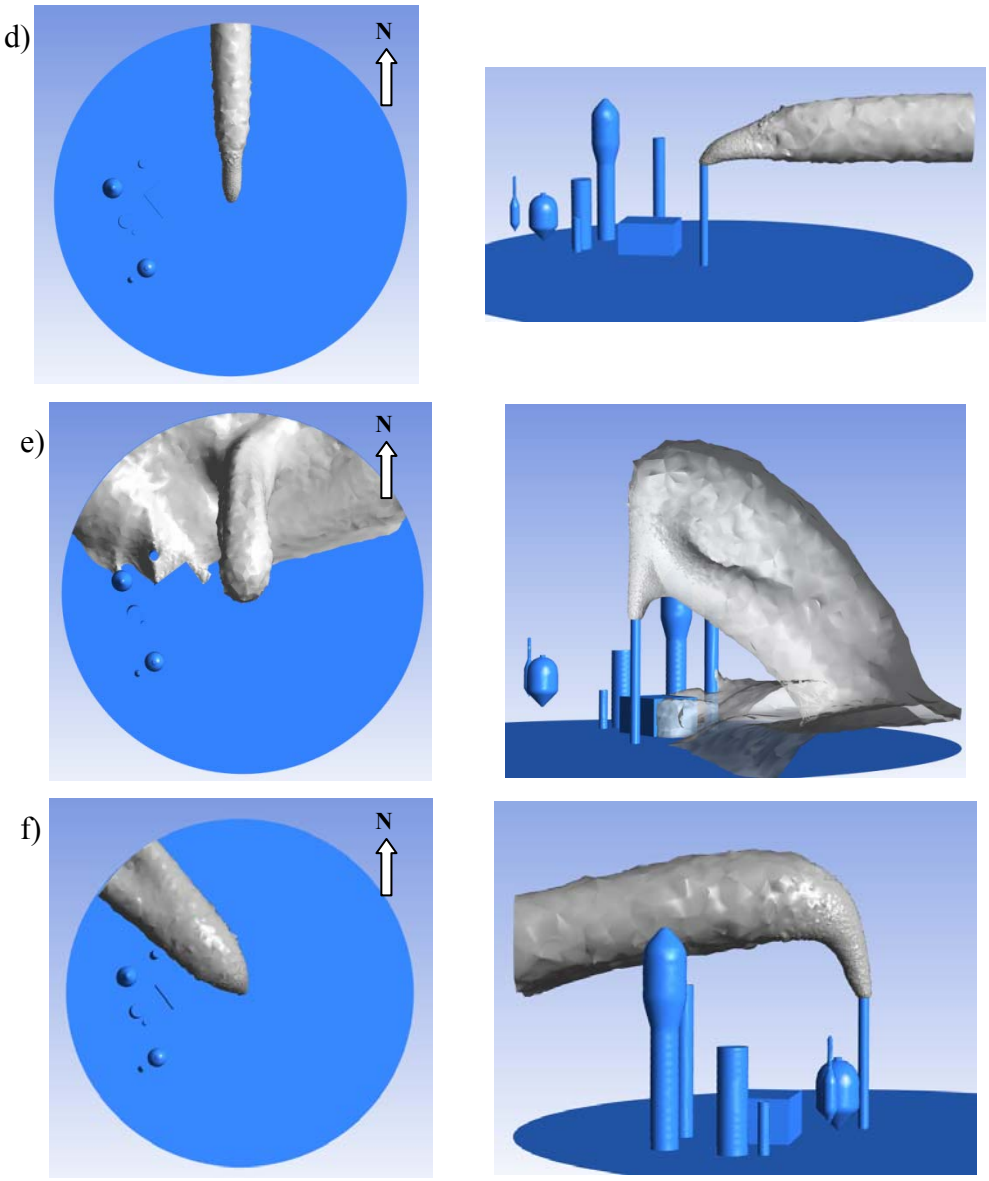


Figura 4.13 Comportamiento de la pluma de los gases de combustión para el caso propuesto

Fuente: Propia, (2010).

En la Figura 4.13 se muestra la vista de planta y de perfil de los meses muestreados donde a) representa las condiciones del mes de enero (v = 4 m/s, SE), b) condiciones

del mes de febrero (v = 8 m/s, N), c) condiciones del mes de marzo (v = 14 m/s, NE), d) condiciones del mes de abril (v = 6 m/s, NE), e) condiciones del mes de julio (v = 1 m/s, N) y f) condiciones del mes de septiembre (v = 2 m/s, NO).

Para ambos casos, el transporte atmosférico, ocurre de forma organizada por lo tanto se pueden apreciar los tres movimientos del aire: advección, convección y turbulencia.

Referente al comportamiento de la pluma al caso actual (Figura 4.12), en cuanto a la variación de la velocidad del viento, se puede observar que, cuando alcanza un máximo, en el caso del mes de marzo, el movimiento ascendente productos de la convección, no es tan notorio como en el caso de los demás meses. En cambio, cuando alcanza un mínimo (mes de julio), el proceso de dispersión radica en principalmente en dicho movimiento convectivo, el movimiento del fluido bajo la influencia de la diferencia de la temperatura, en conjunto con la caída de presión en la atmosfera.

Visto los resultados para el caso propuesto (Figura 4.13), ante cada una de las condiciones en función de la rosa del viento se presenta una notoria disminución en los movimientos convectivos, por ende una elevación de la pluma menor con respecto al caso actual. Estos resultados fueron los esperados, toda vez que la chimenea del proyecto RECA posee una menor altura y un mayor diámetro provocando una disminución en la velocidad de salida de los gases aproximadamente de un 50 % en comparación con los emanados en el D-1.

Por otra parte, la elevación de la pluma es parecida para todos los cosas a pesar de que las velocidades del viento son diferentes. La pluma llega a la horizontalidad a pocos metros de su salida a la atmósfera, como se evidencia en la Figura 4.12.

La elevación o flotabilidad de las plumas ha sido tema de estudio durante muchos años y para calcularla se ha hecho uso de las fórmulas desarrolladas por Gary A. Briggs. [26]. Estas se emplean en plumas con temperaturas mayores que la del aire ambiental. Sin embargo en este estudio la fórmula aplicada fue la siguiente:

$$\Delta h = \frac{1.6 \cdot F^{1/3} \cdot X^{2/3}}{\bar{u}} \qquad (4.1).$$

Donde:

Δh = Elevación de la pluma (sobre la chimenea)z

F = Flujo de flotabilidad

û = Velocidad promedio del viento

x = Distancia a sotavento de la chimenea/fuente

g = Aceleración debido a la gravedad (9,8 $m/s_2$)

V = Tasa volumétrica del flujo del gas de la chimenea

Ts = Temperatura del gas de la chimenea

Ta = Temperatura del aire ambiental

$$F = \frac{g}{\pi} \cdot V \cdot \left(\frac{Ts - Ta}{Ts}\right) \qquad (4.2)$$

Los resultados de la formula permitieron determinar la altura de la línea central horizontal imaginaria, donde se producen las mayores concentraciones de contaminantes, como se muestra en la Figura 4.14. El parámetro X representa el punto donde la pluma se posiciona horizontal estableciendo así una distancia considerable de la chimenea hacia el lado donde cae la pluma, sin una precisión numérica.

A continuación se muestran los resultados de la ecuación de Briggs así como los de las simulaciones

Tabla 4.6 Comparación de las alturas de la pluma.

Fuente: Propia, (2010).

| Condición | Δh Ec. de Briggs | Δh simulaciones |
|---|---|---|
| Caso actual Septiembre | 6,92 m | 7,5 m |
| Caso propuesto Enero (alto) | 5,22 m | 5,38 m |
| Caso propuesto Enero (bajo) | 12,56 m | 11,40 m |

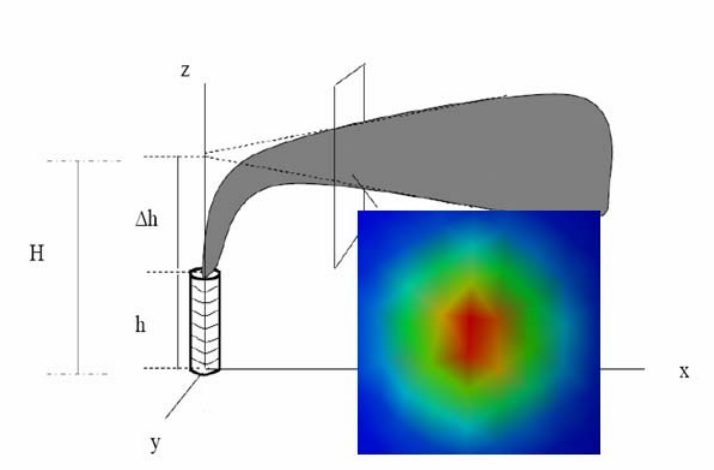


Figura 4.14 Elevación de la pluma H que representa la altura efectiva de la chimenea y corte de la pluma donde se observa las altas concentraciones de elementos contaminantes en el centro de la misma.

Fuente: Propia, (2010).

Haciendo referencia a los resultados presentados en la Tabla 4.6 se destaca la poca discrepancia que existe entre los resultados teóricos con respecto a los que se obtuvieron en la simulación. Es de hacer notar que esta ecuación requiere que la pluma llegue a la horizontalidad, a tales efectos solo se tomaron en cuenta los valores de los meses de septiembre y enero, los cuales presentaron los valores asociados y

exigidos por la formula. A los efectos de la simulación los datos fueron extraídos mediante el uso de líneas en el post-procesador.

Un comportamiento inusual es el que reflejan las Figuras 4.15 y 4.16 respecto a la condiciones del viento para los meses de julio y diciembre, por cuanto la velocidad es la más baja en las simulaciones. En estas se observan que los gases de combustión llegan al suelo a pocos metros de la fuente (chimenea). Este caso se produce debido a que la diferencia tanto de la velocidad de los gases de salida de la chimenea, como la del viento es pequeña.

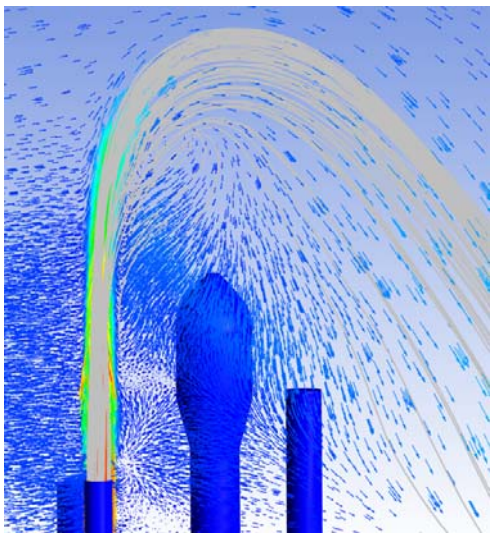

Figura 4.15 Vectores de velocidad.
Fuente: Programa de CFD, (2010).

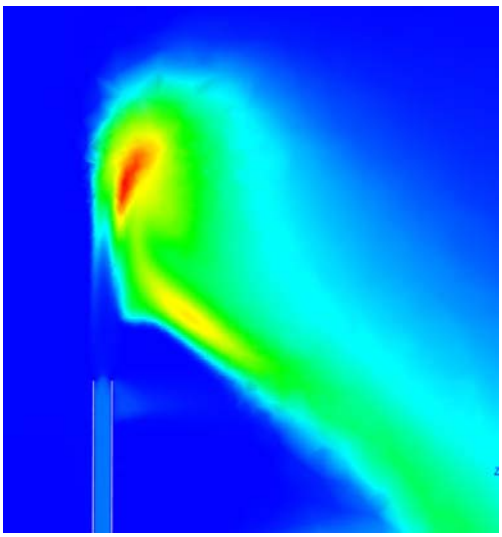

Figura 4.16 Viscosidad de torbellino.
Fuente: Programa de CFD, (2010).

Las Figuras 4.15 y 4.16 muestran el comportamiento del flujo, donde los vectores de velocidad indican los cambios en la dirección de este en la zona posterior de la pluma, la cual está identificada por el color rojo, indicando un alto índice de torbellino, productos de la caída de presión que deja tanto la estela de la chimenea como la de la columna de gases, haciendo que la pluma descienda detrás de la misma.

Este efecto no ocurre en el caso actual ya que la velocidad de salida de los gases de combustión es mucho mayor, permitiendo de esta forma llegar a una altura más elevada, donde la variación de presión en conjunto con los movimientos convectivos lleva a cabo el proceso de dispersión.

### 4.5.2. Dispersión de concentración de los componentes CO, $CO_2$ y $SO_2$

La determinación de la dispersión de estos elementos contaminantes emitidos por la chimenea se logró a partir de los valores de las concentraciones en la frontera de salida del dominio. Los contornos de concentración del $CO_2$ están representados por una escala de color, donde el color rojo muestra la máxima concentración del mismo, ubicado en el centro de la pluma, como se comentó previamente (Ecuación de Briggs).

Las Figuras 4.17, 4.18 y 4.19 que se muestran a continuación permiten establecer una comparación de las concentraciones de los componentes CO, $CO_2$ y $SO_2$ para cada caso. En cuanto al caso actual se obtuvieron para los meses estudiados los menores índices de concentración. Ésto se debe a una mayor velocidad en los gases de salida (43,6 m/s), que con ayuda de la temperatura (1345 K) y la altura de la chimenea del regenerador (64 m), alcanza distancias más altas permitiendo una mejor eficiencia en la dispersión de los mismos. Después de todo lo anterior el comportamiento de las curvas de concentraciones resultaron ser las esperadas.

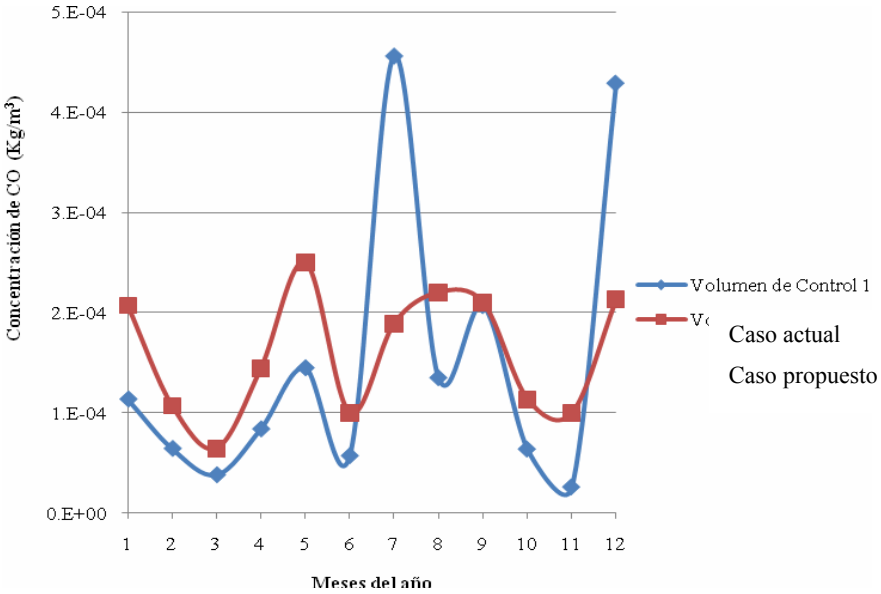


Figura 4.17 Perfil de concentración de CO en función de los meses del año.

Fuente: Propia, (2010).

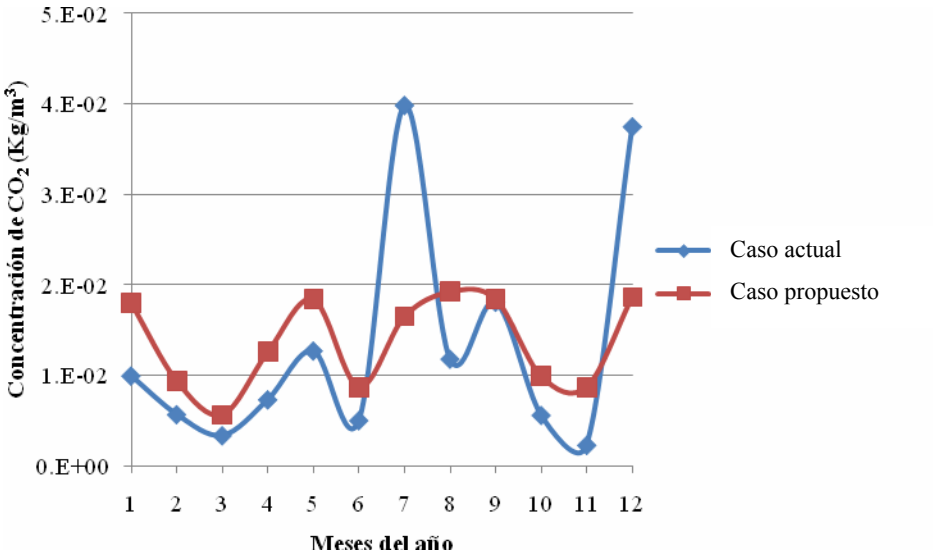


Figura 4.18 Perfil de concentración de $CO_2$ en función de los meses del año.

Fuente: Propia, (2010).

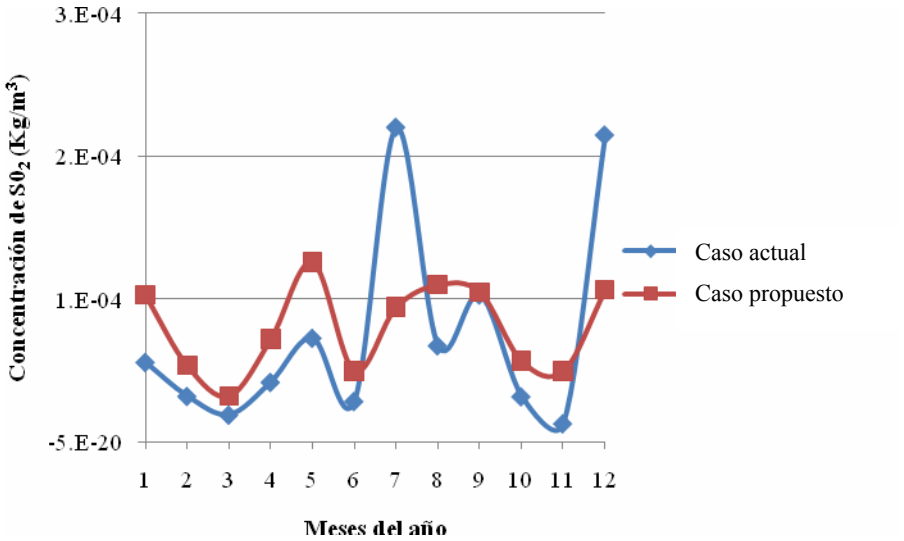


Figura 4.19 Perfil de concentración de $SO_2$ en función de los meses del año.

Fuente: Propia, (2010).

Cabe destacar que las curvas de concentración en función al cambio de velocidad del viento si bien tienen distintos valores para cada uno de los meses, poseen un comportamiento similar en las figuras anteriores, demostrando así, que la velocidad del viento es un factor que influye directamente sobre las concentraciones.

Esto significa, en otras palabras, que cuando el viento incrementa su velocidad las concentraciones de los componentes tienden a disminuir. Este comportamiento de las curvas se debe a las fuerzas de advección o momento, o sea, arrastre de masa de aire de forma horizontal.

Por su parte en el caso actual, los picos de concentración que alcanzan los niveles más altos (los meses de agosto, septiembre y diciembre), motivado a la salida de los

gases del dominio por la parte superior, estando limitado ante la corta distancia que hay desde la salida de los gases hasta este punto. Este efecto no sucede en el caso propuesto, por cuanto los gases salen por un extremo del cilindro al igual a la mayoría de los casos.

Visto desde otra perspectiva las Figuras 4.20 y 4.21 muestran el comportamiento de las concentraciones en función a la altura en el eje Y, arribando en su máxima concentración a una altura mayor a los 50 m. Se hace referencia al momento de compararla con el caso propuesto donde las mayores concentraciones se ubicaron a alturas por debajo de los 50 m, específicamente de 40 hasta casi el nivel del suelo, como se observa en las Figuras 4.22 y 4.23. Esto da a entender que para el caso propuesto se podrían tener problemas de altas concentraciones en zonas de trabajo, como lo es a nivel de losa o en equipos donde la altura de los mismos estén iguales o por encima de la altura de la chimenea del proyecto RECA.

Para levantar las gráficas se establecieron tres (3) líneas a diferentes distancias de la fuente y en dirección del viento, la línea uno (1) a 20 m, la línea dos (2) a 40 m y la línea tres (3) a 60 m, de igual forma se le sumó a la línea 2 y 3, un valor que permita graficar los tres perfiles sin solaparse en una sola gráfica. De modo que se puede evidenciar que a medida que nos alejamos de la fuente las concentraciones de los elementos tienden a disminuir dispersándose a lo largo del eje Y.

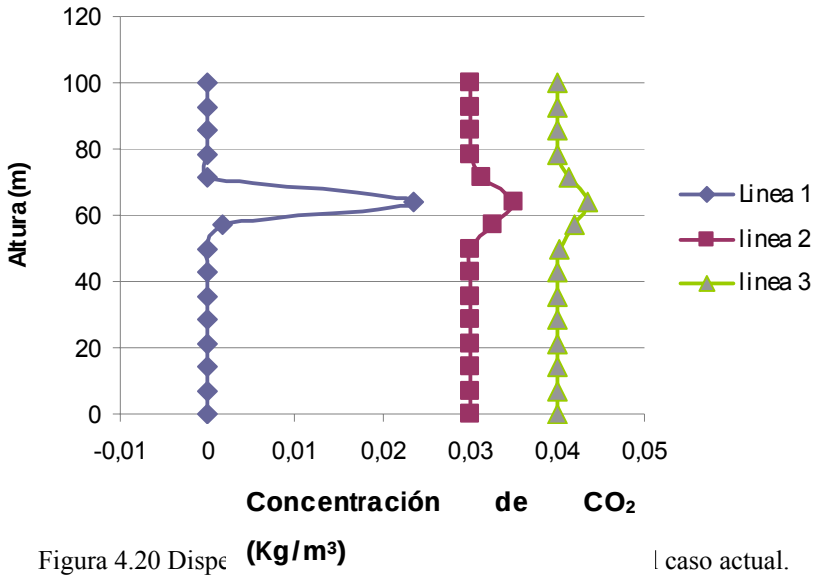


Figura 4.20 Dispe l caso actual.

Fuente: Propia, (2010).

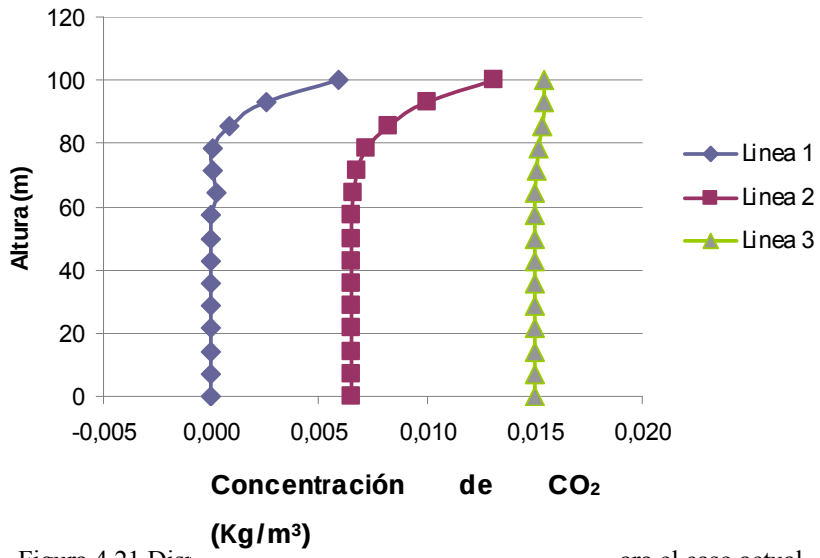


Figura 4.21 Disp ara el caso actual.

Fuente: Propia, (2010).

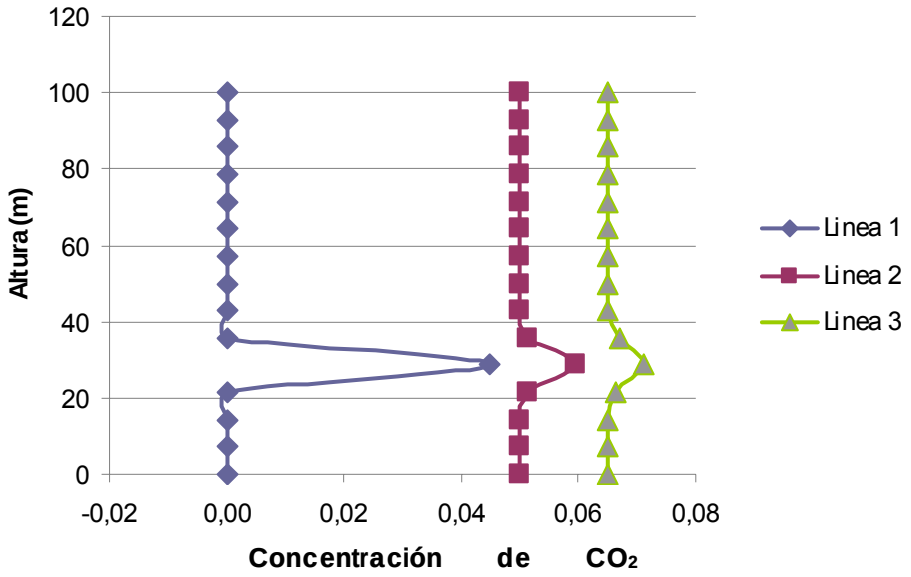


Figura 4.22 Dispersión de $CO_2$ en el mes de marzo para el caso propuesto

Fuente: Propia, (2010).

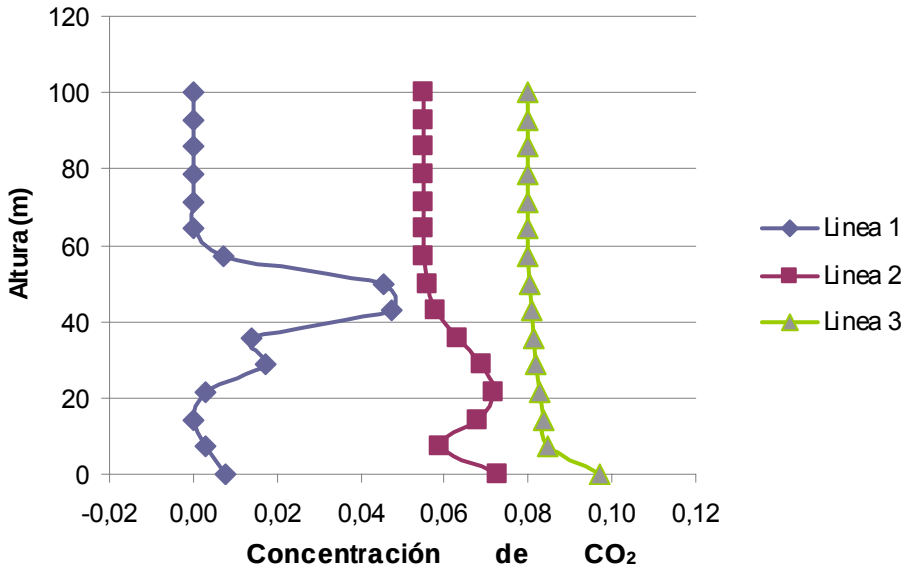


Figura 4.23 Dispersión de $CO_2$ en el mes de diciembre para el caso propuesto

Fuente: Propia, (2010).

### 4.5.3. Distribución de la temperatura en la pluma de los gases de combustión

Para cada uno de los casos se determinó posteriormente la distribución de la temperatura de los gases de combustión aplicando una técnica de CFD los resultados alcanzados se discuten seguidamente:

Como se pueden observar en las Figuras 4.24, 4.25, 4.26 y 4.27, que se presentan a continuación, haciendo uso del proceso seguido en relación a la concentración de los elementos contaminantes mostrado previamente, las curvas de las temperaturas muestran un comportamiento similar. Por ejemplo para el caso actual para el mes de marzo se tienen temperaturas elevadas por encima de una altura de 50 m situación que se repite cuando se trata de la concentración de los contaminantes. Por consiguiente se evidencia que hay una relación entre la temperatura y las concentraciones de los elementos contaminantes. De modo que al existir mayor concentración de elementos la energía se mantiene.

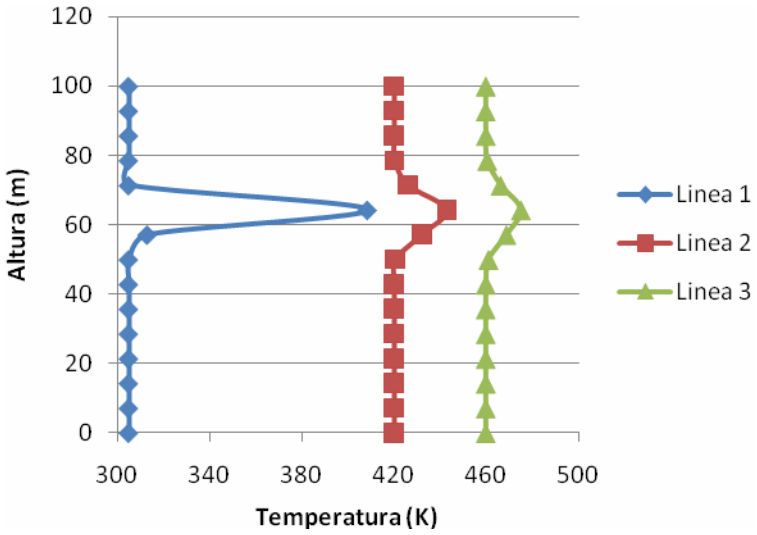


Figura 4.24 Distribución de la temperatura en el mes de marzo para el caso actual.

Fuente: Propia, (2010).

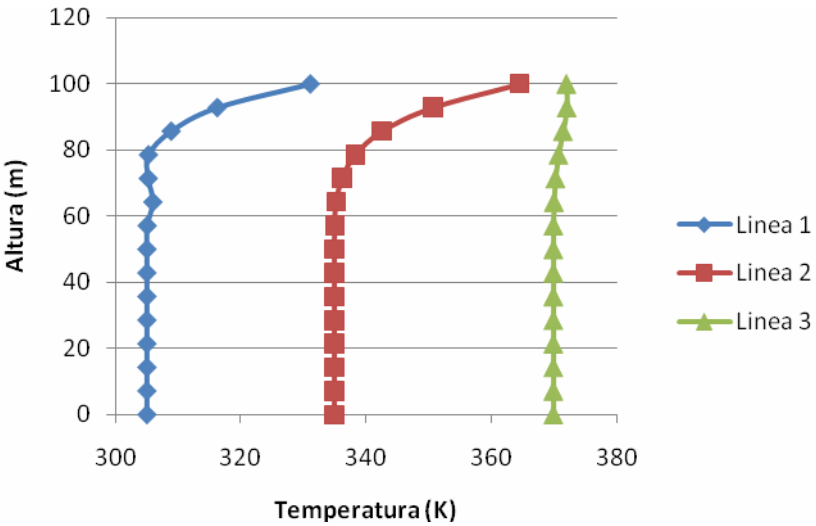


Figura 4.25 Distribución de la temperatura en el mes de diciembre para el caso actual.

Fuente: Propia, (2010).

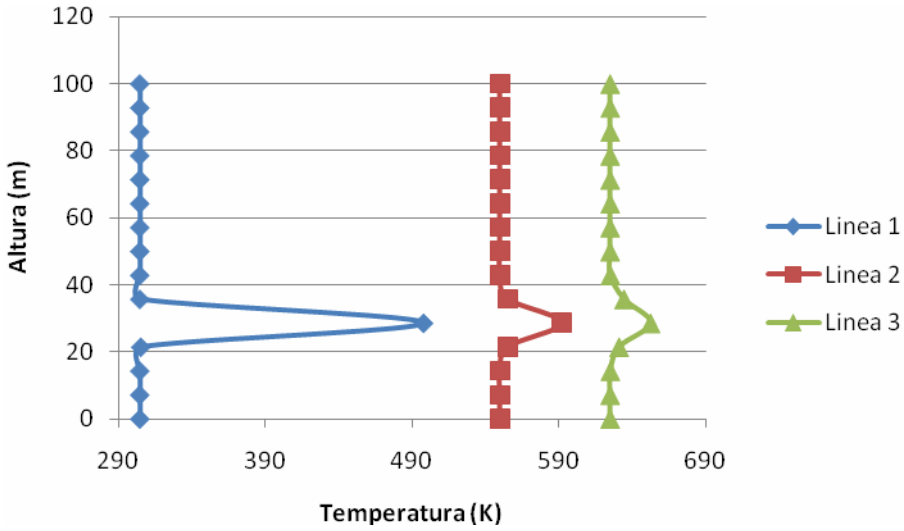


Figura 4.26 Distribución de la temperatura en el mes de marzo para el caso propuesto.

Fuente: Propia, (2010).

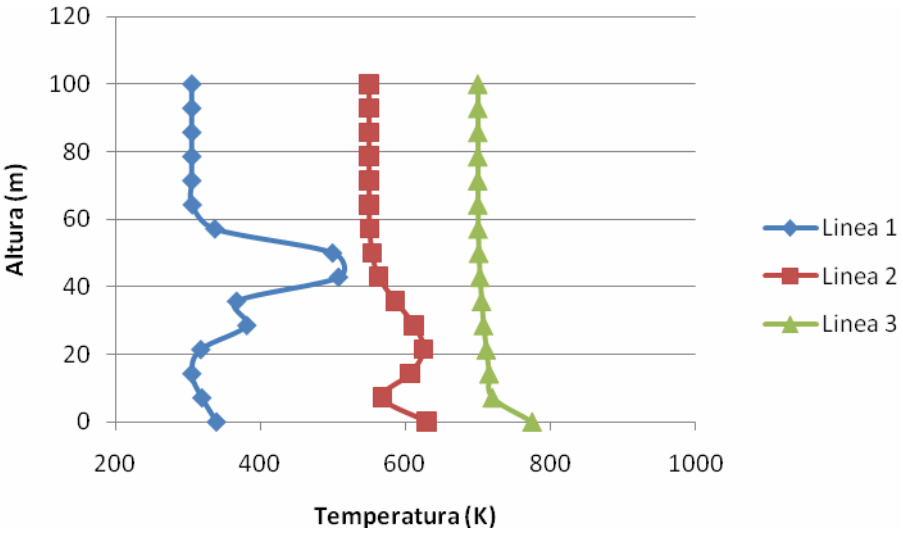


Figura 4.27 Distribución de la temperatura en el mes de diciembre para el caso propuesto.

Fuente: Propia, (2010).

El caso más desfavorable del Volumen de Control 2 (caso propuesto), se tiene cuando la velocidad del viento es igual a 1 m / s, para los meses de julio y diciembre, donde la pluma de los gases choca con el suelo exponiendo a todos los equipos y personal en la zona a altas temperaturas como se puede apreciar en la Figura 4.28

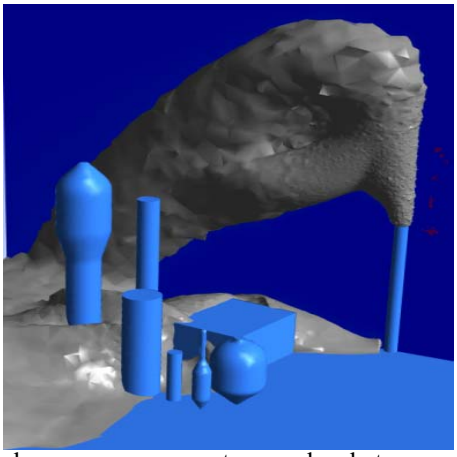

Figura 4.28 Volumen que representa un valor de temperatura de 50 ºC.

Fuente: Programa de CFD, (2010).

Para el caso propuesto, se observa que el comportamiento de la pluma denota una trayectoria donde existen altas temperaturas circundantes a alturas poco pronunciadas como se evidencia en la Figura 4.28 donde existen temperaturas de 50 $^{0}$C a nivel de losa.

### 4.5.4. Efecto del arrastre de finos de catalizador sobre las instalaciones existentes

A los fines del trabajo se tomó en cuenta un diámetro de partículas que va desde 1 a 6 micrones. Dichas partículas son influenciadas totalmente por el movimiento en si fluido, por lo tanto, se acoplan al mismo comportamiento. De modo que la trayectoria de la partícula en el volumen de control sufre los mismos efectos de los gases de combustión.

En todas las simulaciones el flujo másico de partículas que entran al dominio hacen su recorrido por el mismo y salen nuevamente, caso particular es cuando la pluma de la chimenea choca contra el piso. En este caso, por no haber observado el efecto de acumulación de catalizador en el suelo, se realizó un aumento del diámetro de la partícula hasta lograr, de hecho, que estas se asentaran en el mismo, observando los choques durante su trayectoria hasta detenerse un porcentaje de ellas. Como se muestra en las Figuras 4.29 y 4.30.

Físicamente, se partió del principio que este choque al producir una reacción a la partícula esta disminuiría su energía cinética, provocando que se depositen en el suelo. De igual modo que al encontrarse cerca del suelo la velocidad del fluido tiende a ser cero, obligando a las partículas a que se queden en el.

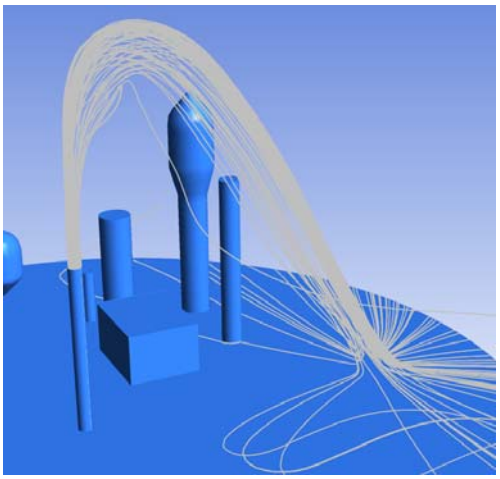

Figura 4.29 Trayectoria de las partículas con diámetros entre 1 y 6 micrones.
Fuente: Programa de CFD, (2010).

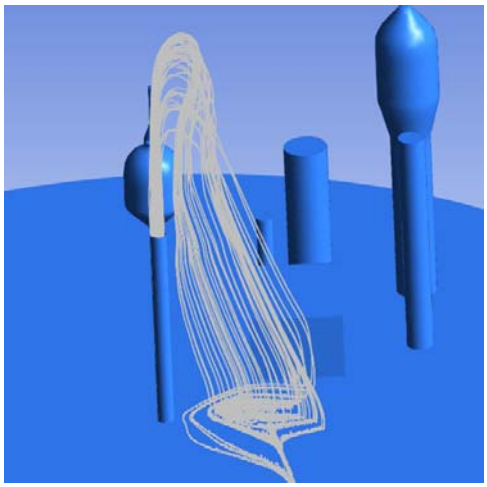

Figura 4.30 Trayectoria de las partículas con un diámetro de 500 micrones.
Fuente: Programa de CFD, (2010).

Siguiendo este orden de ideas, el aumento de diámetro al que se hizo mención fue de 500 micrones, donde el 76 % del flujo másico de las partículas no salen del dominio, quedando depositadas en el suelo, alcanzando así lo previsto por el programa CFD. Según el mismo, por defecto asigna el valor 1 al coeficiente de restitución de modo que cuando la partícula choca contra el suelo o pared esta rebotará a la misma magnitud con que chocó, de tal forma que rebotará sin disminuir su intensidad.

En esta dirección, en lo atinente al comportamiento de la partícula se evidencia que su diámetro tiene un efecto en su comportamiento y que cuando se trata de diámetros muy pequeños, como en el caso expuesto, estas son perturbadas con gran facilidad por cualquier variación en su entorno, la velocidad con que caería la pluma en el caso propuesto que evita que las partículas toquen el suelo, logrando que estas se dispersen por el mismo hasta salir del dominio, trayendo como consecuencia el flujo de partículas a nivel de losa, afectando directamente al personal que elabora en el área.

# CAPÍTULO V

# CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Luego del análisis de los resultados se arriban a las siguientes conclusiones

- En el análisis de sensibilidad del mallado del dominio se tomó en cuenta la velocidad de los fluidos en la salida de los gases de combustión. Para el volumen de control 1 (caso actual) se seleccionó un mallado con 2.155.048 elementos y para el volumen de control 2 (caso propuesto) un mallado con 2.104.557 elementos, estos mallados se seleccionaron ya que obtuvieron un margen de error por debajo del 5% con respecto al más denso.

- Se estableció una comparación entre los diferentes valores que toma la constante que representa la intensidad de turbulencia y la constante Ru, cuyos resultados similares permitieron la escogencia de un valor dentro de este rango para la representación de los flujos externos.

- Las simulaciones realizadas en el proyecto presentaron características marcadas donde la velocidad del viento juega un papel muy importante en la disipación de los gases contaminantes.

- Las ecuaciones de Briggs para el cálculo de las elevaciones de las plumas arrojaron resultados con una diferencia del 7 % aproximadamente, en comparación a los obtenidos por la simulación. Demostrando de esta forma la confiabilidad de los resultados.

- En los resultados presentados se muestran la comparación de las concentraciones de los componentes CO, $CO_2$ y $SO_x$ para cada caso. En el caso actual se obtuvieron para los meses estudiados los menores índices de concentración, es decir, se confirma que los gases alcanza distancias más altas permitiendo una mejor eficiencia en la dispersión de los mismo, mientras que, en el caso propuesto la situación ocurre de forma inversa, esto se debe a una mayor velocidad en los gases de salida (43,6 m/s), que con ayuda de la temperatura (1345 K) y la altura de la chimenea del regenerador (64 m), alcanza distancias más altas.

- De igual manera en el caso actual se constata en los meses observados, que las temperaturas más elevadas se ubican por encima de los 50 m, en contraste con el caso propuesto que se encuentran por debajo de este nivel en el mismo período. Por consiguiente, existe una relación entre la temperatura y las concentraciones en ambos casos, que se ven influenciadas por el viento.

- En lo referente al arrastre de partículas de catalizador, se pudo observar en el caso propuesto el flujo de partículas a nivel de losa a poca distancia de su emisión, en los meses donde la magnitud de la velocidad del viento fue la menor, efecto que no se obtuvo para el caso actual.

# RECOMENDACIONES

- A fin de evitar que el flujo de partículas toquen el suelo, afectando directamente al personal, se recomienda, los modelos de simulación que pueden ser utilizados con diversos objetivos; entre ellos destacan; el desarrollo de estrategias de control, en la evaluación del impacto ambiental, en el análisis de tendencias de calidad de aire, en la selección del sitio apropiado para ubicar estaciones de monitoreo, estudios de diseños de chimeneas, entre otros.

- Proporcionar un método convenientemente documentado por los datos meteorológicos, ya que los análisis de dispersión consideran generalmente valores medios horarios para los datos del viento tomando en cuenta la velocidad, la dirección y el tiempo promediado.

- En el estudio de las bases que fundamentan el proceso de recuperación de finos de catalizador en la unidad de Craqueo Catalítico Fluidizado de la RPLC y la dispersión de concentración de los componentes CO, $CO_2$ y $SO_x$, en función a la rosa del viento, se tomaron datos correspondiente a los años 1984, por lo que se recomienda utilizar datos actualizados.

# BIBLIOGRAFÍA


[1] DECRETO 638. ***"Normas sobre calidad de aire y control de la contaminación atmosférica".*** Gaceta Oficial de la República Bolivariana de Venezuela Nº 4.889 (2005).

[2] PDVSA N° 282910105DG12601. ***"Memoria Descriptiva"***, Reducción de Emisión de Catalizadores en FCC (2009).

[3] CORCEGA, F. "***Evaluación de las emisiones de COV de los sistemas de deshidratación con glicol de la planta de extracción San Joaquín",*** Trabajo de Ascenso, Universidad de Oriente. (2009).

[4] HERNANDEZ, M. **"*Simulación numérica del flujo ascendente a través de un generador eólico"***, Tesis de Grado, Universidad de Oriente. (2006).

[5] THOMAS, C. ***"Catalytic Processes and Proven Catalysts"*** Academic Press, New York (1970).

[6] NELSON W. ***"Petroleum Refinery Engineering"*** 4ta Edición McGraw-Hill Book Company, New York, (1958).

[7] BARREIRA, V. *"**Estudio Hidrodinámico de un Lecho Fluidizado"** E*scuela Politécnica Superior, Abril (2007).

[8] http://www.wisegeek.com/what-is-a-fluid-catalytic-cracking-unit-fccu.htm

[9] HANDWERK, G. ***"Refino de petróleo: tecnología y economía"*** Editorial Reverté. España (2003).

[10] GÓMEZ, V. *"**Aplicación de modelos de dispersión atmosférica en la elaboración de planes de acción locales para mejorar la calidad del aire y estudios de impacto ambiental"*** CONAMA (2008).

[11] MOORE C. ***"Contaminación del Aire – Un Manual para Periodistas".*** Centro Internacional para Periodistas. Washington, DC (2006).

[12] SCHWERDTFEGER, W. ***"World Survey of Climatology, Volume 12: Climates of Central and South America".*** Elsevier Scientific Publishing Company. (1976).

[13] GALLARDO, L. ***"Modelos de dispersión de contaminantes atmosféricos"*** CONAMA, Santiago – Chile, (1997).

[14] KIELY, G. ***"Ingeniería ambiental. Fundamentos, entornos, tecnologías y sistemas de gestión".*** McGraw-Hill, Madrid (1999).

[15] KEILY, G. "***Ingeniería Ambiental".*** Volumen II. Editorial McGraw-Hill, España (1999).

[16] WHITE, F. ***"Mecanica de Fluidos"*** Editorial McGraw Hill, 5ta Edicion, España (2003).

[17] ANSYS ***"CFX 10.0 User´s Manual".*** (2002).

[18] BALLESTEROS, R. ***"Técnicas Numéricas en Mecánica de los Fluidos".*** Universidad de Oviedo. España (2003).

[19] MOTT, R. ***"Mecánica de fluidos"*** Sexta edición. Editorial Pearson Education (2006).

[20] THOMSON, J. ***"Numerical Grid Generation: Foundations and Applications"***, Editorial Joe F. Thomson. North-Holland (1982).

[21] DECONICK, H. ***"Overview of Grid Generation Methods",*** Lecture Series del von Karman Institute for Fluids Dynamics. Bélgica (1994).

[22] WILCOX, F. ***"Turbulence Modeling for CFD",*** DCW Industries (1993).

[23] http://www.talentfactory.dk/es/tour/wres/shear.htm

[24] HAROUTANIA, V. ***"FIDAP 8. Advance course in turbulence. Course note".*** Primera Edicion. Estados Unidos (1999).

[25] GÓMEZ, F. ***"Dispersión de contaminantes en la atmósfera. Aplicación práctica de un modelo de simulación"***. Universidad de Zaragoza. Octubre de (1999).

[26] PASQUILL, F. ***"Atmospheric Diffusion".*** Editorial John Wiley & Sons. Nueva York (1983).

# APÉNDICE

## Apéndice A

- Cálculo para comprobar incompresibilidad a través del número adimensional de Mach, Ma; para el flujo del gas en la chimenea

$$Ma = \frac{c}{a} = \frac{V}{\sqrt{K.R.T}}$$

$$Ma \approx \frac{32{,}9121}{\sqrt{(1{,}4)(287)(298)}}$$

$$Ma \approx 0{,}09 << 0{,}3$$

- Cálculo del número adimensional de Reynolds
  - Caso propuesto (chimenea)

$$\mathrm{Re} = \frac{V.D.\rho}{\mu}$$

$$Q = \frac{\dot{m}}{\rho} = \frac{180000\, lb/h}{0{,}0368\, lb/pie^3} \qquad Q = V.A;$$

$$Q = 4891304{,}3478\, pie^3/h \qquad V = \frac{4891304{,}3478}{\frac{\pi}{4}(5{,}99081)^2} = 173525{,}6561\, pie/h$$

$$V = 14{,}691 m/s$$

$$\mathrm{Re} = \frac{(14{,}691)(1{,}825)(0{,}588)}{4{,}2.10^{-5}} = 375560{,}724$$

  - Caso actual (Regenerador D-1)

$$\mathrm{Re} = \frac{(32{,}9121)(1{,}426)(0{,}588)}{4{,}2.10^{-5}} = 657057{,}1644$$

- Longitud de entrada de la chimenea al dominio
  - Caso actual

$$Le = 4{,}4.\mathrm{Re}^{1/6}.D$$

$$Le = 4{,}4(\mathrm{Re})^{1/6}(1{,}426) = 58{,}50m$$

  - Caso propuesto

$$Le = 68{,}244$$

- Calculo de la ecuación de Gary A. Briggs

$$\Delta h = \frac{1{,}6F^{1/3}x^{2/3}}{\overline{u}} \qquad F = \frac{g}{\pi}.V\left(\frac{T_s - T_a}{T_s}\right)$$

  - Para el caso de enero alto tenemos

$$\Delta h = \frac{1{,}6F^{1/3}(24{,}68)^{2/3}}{(12)}$$

$$F = \frac{g}{\pi}.(38{,}47)\left(\frac{1345 - 305}{1345}\right) = 92{,}886$$

$$\Delta h = 5{,}2265m$$

- Calculo del numero de Stokes

$$S_{tv} = \frac{\tau_v}{T_f} \qquad \tau_v = \left(\frac{2}{9}\right)\left(\frac{\rho_{particula}}{\mu_{fluido}}\right)(a)^2 \qquad T_f = \frac{\phi_{chimenea}}{V}$$

$$T_f = \frac{1{,}826}{14{,}691} = 0{,}1242$$

$$\tau_v = \left(\frac{2}{9}\right)\left(\frac{1439{,}77}{1{,}844.10^{-5}}\right)\left(3.10^{-6}\right)^2 = 0{,}0001564$$

$$S_{tv} = 0{,}00125$$

# METADATOS PARA TRABAJOS DE GRADO, TESIS Y ASCENSO:

| | |
|---|---|
| **TÍTULO** | "ANÁLISIS DE DISPERSIÓN DE ELEMENTOS CONTAMINANTES EMITIDOS A TRAVÉS DE LA NUEVA CHIMENEA DE LA UNIDAD DE CRAQUEO CATALÍTICO FLUIDIZADO DE LA REFINERÍA PUERTO LA CRUZ" |
| **SUBTÍTULO** | |

**AUTOR (ES):**



| APELLIDOS Y NOMBRES | CÓDIGO CVLAC / E MAIL |
|---|---|
| **Ortiz Mas, Carlos Eduardo** | **CVLAC: 17.535.318**<br>**E MAIL: carlos.ortiz.mas@gmail.com** |
| | **CVLAC:**<br>**E MAIL:** |



**PALABRAS O FRASES CLAVES:**


Craqueo Catalítico Fluidizado

Chimenea

Separador de Tercera Etapa

Dinámica de Fluidos Computacional (CFD)

Dispersión

Discretización

Mallado

Ecuaciones del Flujo de fluidos

## METADATOS PARA TRABAJOS DE GRADO, TESIS Y ASCENSO:

| ÀREA | SUBÀREA |
|---|---|
| Ingeniería y ciencias aplicadas | Ingeniería Mecánica |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |

**RESUMEN (ABSTRACT):**

En el presente trabajo de investigación se realizó un análisis de dispersión de elementos contaminantes emitidos a través de la nueva chimenea de la unidad de craqueo catalítico fluidizado de la refinería Puerto La Cruz, empleando técnicas de dinámica de fluido computacional (CFD). Para este estudio se tomaron en cuenta dos casos en particular, refiriéndose al caso actual, la expulsión de los gases de combustión directamente del regenerador D-1 con una altura de 64 m y un diámetro de 1.426 m y para el caso futuro, la expulsión de los gases de combustión es a través de la nueva chimenea con 24.68 m de altura y 1.826 m. Se discretizó el dominio de cálculo empleando la técnica de mallado no estructurado, para cada caso. Posteriormente se describieron las ecuaciones que rigen el comportamiento del flujo en estado estacionario, y se empleo el modelo de turbulencia k-ε. Las simulaciones se llevaron a cabo estableciendo condiciones iguales para cada caso con el fin de establecer una comparación cualitativa entre las mismas, donde se empleó un gas como fluido continuo con concentraciones de CO, $CO_2$ y $SO_2$ conocidos y partículas solidas (finos de catalizador) con diámetros de 1 a 6 micrones, considerando las rosas del viento. Posteriormente se analizó el comportamiento de la pluma de los gases variando la velocidad y dirección del viento. Por medio de perfiles de concentración y temperatura se estableció diferencia en cuanto a la dispersión de estos parámetros y se estudio el comportamiento de las partículas y el efecto de arrastre sobre las instalaciones existentes en el área de estudio, finalmente se establecieron las conclusiones y recomendaciones producto de los análisis realizados.

## METADATOS PARA TRABAJOS DE GRADO, TESIS Y ASCENSO:

**CONTRIBUIDORES:**

| APELLIDOS Y NOMBRES | ROL / CÓDIGO CVLAC / E_MAIL | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| Ayala, Orlando | ROL | CA | AS - X | TU | JU |
| | CVLAC: | | | | |
| | E_MAIL | | | | |
| | E_MAIL | | | | |
| González, Yordy | ROL | CA | AS | TU | JU - X |
| | CVLAC: | | | | |
| | E_MAIL | | | | |
| | E_MAIL | | | | |
| Rodríguez, Anabelis | ROL | CA | AS | TU | JU - X |
| | CVLAC: | | | | |
| | E_MAIL | | | | |
| | E_MAIL | | | | |
| | ROL | CA | AS | TU | JU |
| | CVLAC: | | | | |
| | E_MAIL | | | | |
| | E_MAIL | | | | |

**FECHA DE DISCUSIÓN Y APROBACIÓN:**

| 2010 | 10 | 14 |
|---|---|---|
| AÑO | MES | DÍA |

**LENGUAJE. SPA**

## METADATOS PARA TRABAJOS DE GRADO, TESIS Y ASCENSO:

**ARCHIVO (S):**

| NOMBRE DE ARCHIVO | TIPO MIME |
|---|---|
| TESIS. ANALISISDEDISPERSION. DOC | Application/msword |
| | |
| | |

**CARACTERES EN LOS NOMBRES DE LOS ARCHIVOS**: A B C D E F G H I J K L M N O P Q R S T U V W X Y Z. a b c d e f g h i j k l m n o p q r s t u v w x y z. 0 1 2 3 4 5 6 7 8 9.

**ALCANCE**

**ESPACIAL:** _____ (**OPCIONAL**)

**TEMPORAL:** _____ (**OPCIONAL**)

**TÍTULO O GRADO ASOCIADO CON EL TRABAJO:**

INGENIERO MECÁNICO

**NIVEL ASOCIADO CON EL TRABAJO:**

PRE-GRADO

**ÁREA DE ESTUDIO:**

DEPARTAMENTO DE MECÁNICA

**INSTITUCIÓN:**

UNIVERSIDAD DE ORIENTE, NÚCLEO ANZOÁTEGUI.

**METADATOS PARA TRABAJOS DE GRADO, TESIS Y ASCENSO:**

**DERECHOS**

De acuerdo al artículo 41 del reglamento de trabajos de grado.

"Los Trabajos de Grado son de la exclusiva propiedad de la Universidad de Oriente, y sólo podrán ser utilizados para otros fines con el consentimiento del Consejo de Núcleo respectivo, quién deberá participarlo previamente al Consejo Universitario, para su autorización"

**HERNÁNDEZ RIVERA, JONATHAN ALEXANDER**
AUTOR

| Rengel, José | Espinoza, Henry | Camargo, Lino |
|---|---|---|
| **JURADO** | **TUTOR** | **JURADO** |

**POR LA SUBCOMISIÓN DE TESIS**

Diógenes Suárez