



UNIVERSIDAD DE GUANAJUATO

CAMPUS GUANAJUATO
DIVISIÓN DE CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA

**“MODELADO Y SIMULACIÓN NUMÉRICA DE UN HORNO
PARA DESINTEGRACIÓN TÉRMICA DE PETRÓLEO Y
PREDICCIÓN DE LA FORMACIÓN DE COQUE”**

TESIS PROFESIONAL

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

DOCTOR EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA

PRESENTA:

MIQ. JUAN NICOLÁS FLORES BALDERAS

DIRECTORES:

**DR. JORGE ARTURO ALFARO AYALA
DR. ALBERTO FLORENTINO AGUILERA ALVARADO
DR. AGUSTÍN RAMÓN URIBE RAMÍREZ
DR. JOSÉ DE JESÚS RAMÍREZ MINGUELA**

GUANAJUATO, GTO.

NOVIEMBRE 2021

DEDICATORIA

El presente trabajo quiero dedicarlo a los seres más maravillosos del mundo: a mi hijo Nicolás y a mi esposa Brenda, así como a mi madre, Ana María Balderas Vallejo y mi padre, José Luis Flores Arias; por ser el motor de mi vida, su apoyo incondicional durante toda mi carrera y por alentarme cada día para ser mejor persona.

AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer al Todo Poderoso, a Dios, por guiarme en el recorrido de mi vida por este mundo.

A toda mi familia, a mis hermanos, Susana, José Luis, Ana Luisa, Hugo, por haber creído siempre en mí, resaltando el apoyo especial de mi hermano Adán, quien siempre ha sido mi inspiración en mi preparación profesional.

A mi tía Teresa Balderas Vallejo, quien se nos adelantó a la vida eterna, quiero agradecer su apoyo en los momentos difíciles que viví.

A todos mis tíos (los Balderas), por su apoyo motivacional durante toda mi carrera.

A todos mis amigos y compañeros del Doctorado, Christian, Oscar, Jorge (Colín), Francisco Conejo, Gabriel (Gabo) y Lorena. Por los momentos de trabajo en equipo, convivencia, compañerismo, amistad, ayuda y logros alcanzados.

A mis asesores de tesis, Dr. Arturo, Dr. Agustín y el Dr. Minguela. Por su apoyo profesional y motivacional para culminar este trabajo de tesis.

Quiero agradecer especialmente a mi asesor Alberto Florentino, quien desgraciadamente se nos adelantó al eterno descanso. Por su gran apoyo profesional, consejos, recomendaciones y palabras de aliento. Siempre lo recordare como un excelente ser humano, a quien le emocionaría enormemente este trabajo. Que Dios lo tenga en su Santa Gloria, descase en paz.

A la Universidad de Guanajuato, que por medio de la División de Ciencias Naturales y Exactas y el Departamento de Ingeniería Química me preparo para ser un buen profesionista y afrontar los retos tecnológicos del país.

Quiero agradecer especialmente al CONACYT por el apoyo económico recibido durante estos cuatro años, el cual me permitió subsistir.

RESUMEN

En este trabajo, se presenta un enfoque novedoso para predecir el crecimiento de la capa de ensuciamiento en la superficie interna de un tubo mediante un modelo transitorio de dinámica de fluidos computacional (CFD). El modelo transitorio de dinámica de fluidos computacional toma en cuenta la complejidad de los fenómenos químicos y físicos junto con la malla dinámica. El método de malla dinámica está programado por las funciones definidas por el usuario (*User-Defined Functions*, UDFs) para permitir que crezca el ensuciamiento en la superficie interna del tubo. El estudio se realiza a través de la dinámica de fluidos computacional en un dominio computacional 2D que contempla los efectos radiales, tales como: perfiles radiales de temperatura, velocidad, y consumo y producción de especies por reacciones químicas. Este enfoque se aplica a los depósitos de ensuciamiento en la superficie interna de un tubo de un calentador petroquímico a fuego directo, debido al proceso de desintegración térmica del petróleo. Se obtuvieron resultados del campo de distribución de la temperatura, la velocidad del petróleo, la concentración del destilado y coque. Además, se predice el crecimiento de la capa de ensuciamiento debido al depósito y la acumulación a lo largo del tiempo y se calcula la temperatura de metal del tubo (TMT) para identificar los "puntos calientes". Según los resultados, la capa de ensuciamiento reduce el diámetro del tubo hasta un 24% en la salida en comparación con el tubo limpio, por lo que el flujo de fluido del petróleo aumenta su velocidad debido a la reducción de la sección transversal, en consecuencia la temperatura de película del petróleo y la velocidad de ensuciamiento disminuyen, esto conduce a un breve incremento en el tiempo de operación, sin embargo, aparecen "puntos calientes" debido a un alto incremento de la temperatura de metal del tubo a la salida. Los "puntos calientes" aparecen cuando se alcanza el tiempo de operación de 16.8 meses, esto se debe a que se ha superado la temperatura de metal del tubo (950 K). Finalmente, es obtenida una mejor predicción del ensuciamiento en el desempeño de los intercambiadores de calor con este nuevo enfoque, que considera: la malla dinámica a través de la dinámica de fluidos computacional, el espesor de la capa ensuciamiento con los efectos de la temperatura de metal del tubo, la hidrodinámica del flujo, reacciones químicas y transferencia de masa.

ABSTRACT

In this work, a novel approach to predict the fouling layer growth on the internal surface of a tube by means of a transient computational fluid dynamics (CFD) model is presented. The transient computational fluid dynamics model takes into account the complexity of the chemical and physical phenomena coupled with dynamic mesh. The dynamic mesh method is programmed by the User-Defined Functions (UDFs) for allowing to grow the fouling on the internal surface of the tube. The study is carried out through the computational fluid dynamics in a 2D computational domain which contemplates the radial effects, such as: radial profiles of temperature, velocity, and the consumption and productions of species due to chemical reactions. This approach is applied for the fouling deposits on the internal surface of a tube of a petrochemical fired heater, due to the thermal cracking process of oil. Results of the temperature, the oil velocity, the concentration of the distillate and the coke distribution fields are obtained. Moreover, the fouling layer growth due to the deposit and accumulation along the time is predicted and the tube metal temperature (TMT) is computed to identify the “hot spots”. According to the results, the fouling layer reduces the diameter of the tube until 24% at the exit in comparison with the clean tube, thus the fluid flow of the oil increases its velocity due to the reduction of the cross-sectional section, in consequence the oil film temperature and the fouling rate decrease, these lead to the apparition of the “hot spots” due to a high increment of the tube metal temperature at the exit. The “hot spots” appeared when the run-length of 16.8 months is reached, this is due to the tube metal temperature has been exceeded (950 K). Finally, a better prediction of the fouling in the performance of heat exchangers with this new approach, that considers: the dynamic mesh through computational fluid dynamics, the thickness of the fouling layer with the effects of the tube metal temperature, the hydrodynamics of the flow, chemical reactions and mass transfer, is obtained.

CONTENIDO

DEDICATORIA	ii
AGRADECIMIENTOS	iii
RESUMEN	iv
ABSTRACT	v
CONTENIDO	vi
LISTA DE FIGURAS	ix
LISTA DE TABLAS	xi
NOMENCLATURA	xii
CAPÍTULO I. INTRODUCCIÓN	
1.1. ANTECEDENTES	1
1.2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	5
1.3. JUSTIFICACIÓN	6
1.4. OBJETIVOS	8
1.4.1. Objetivo general	8
1.4.2. Objetivos particulares	8
1.5. HIPÓTESIS	9
CAPÍTULO II. MARCO TEÓRICO	
2.1. INTRODUCCIÓN	10
2.2. CALENTADORES A FUEGO DIRECTO	11
2.3. DESINTEGRACIÓN TÉRMICA DEL PETRÓLEO	12
CAPÍTULO III. MODELOS MATEMÁTICOS	
3.1. INTRODUCCIÓN	16
3.2. FLUJO COMPLETAMENTE DESARROLLADO	17
3.3. MODELO CINÉTICO QUÍMICO DE LA DESINTEGRACIÓN TÉRMICA DEL PETRÓLEO	18

3.4.	ECUACIÓN DE CONTINUIDAD	20
3.5.	MODELO DE TRANSPORTE DE ESPECIES	20
3.6.	ECUACIÓN DE MOMENTO	22
3.7.	MODELO DE TURBULENCIA	23
3.8.	ECUACIÓN DE ENERGÍA	24
3.9.	MODELO DE ENSUCIAMIENTO POR COQUE	25
3.10.	CARACTERIZACIÓN DEL PETRÓLEO	29
3.10.1.	Temperatura Media Gravimétrica (<i>Weight Average Boiling Point</i> , WABP) y Temperatura Media Volumétrica (<i>Volume Average Boiling Point</i> , VABP)	29
3.10.2.	Factor de caracterización K_{UOP}	31

CAPÍTULO IV. SIMULACIÓN

4.1.	GEOMETRÍA Y CONDICIONES DE FRONTERA	33
4.2.	MALLA DINÁMICA	37
4.3.	ESTRATEGIA DE SOLUCIÓN.....	39

CAPÍTULO V. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

5.1.	VALIDACIÓN DEL MODELO	42
5.2.	ANÁLISIS GENERAL	44
5.2.1.	Campo de temperatura, fracción masa de coque y fracción masa de destilado.....	44
5.2.2.	Perfil del espesor local de la capa de ensuciamiento en el tiempo de operación.....	47
5.2.3.	Perfiles de velocidad de flujo de masa de petróleo	48
5.2.4.	Perfiles de temperatura de película del petróleo y razón de resistencias térmicas	49
5.2.5.	Perfiles del coeficiente convectivo de transferencia de calor del flujo	51
5.2.6.	Perfiles de la velocidad de coquización	51
5.2.7.	Perfiles de la temperatura de metal del tubo (TMT)	52
5.2.8.	Temperatura de metal del tubo máxima contra el tiempo	53
5.2.9.	Campo de velocidad y temperatura en el tubo a lo largo del tiempo de operación.....	54
5.2.10.	Perfiles de velocidad a lo largo del tiempo de operación en la salida del tubo	57

CAPÍTULO VI. CONCLUSIONES

6.1.	CONCLUSIONES	58
6.2.	APORTACIÓN DE LA TESIS.....	59
6.3.	TRABAJO A FUTURO	60
	REFERENCIAS	61
	LISTA DE PUBLICACIONES	65
	ANEXOS	67
	ANEXO A. FUNCIONES DEFINIDAS POR EL USUARIO (UDFs)	67
A.1.	Propiedades físicas, términos fuente para las especies (pseudo-componentes) y perfil de velocidad a la entrada del tubo	67
A.2.	Calculo de la velocidad de coquización, incremento del espesor de la capa de ensuciamiento y movimiento de las mallas dinámicas.....	73

LISTA DE FIGURAS

Fig. 2. 1. Calentador tipo horizontal (API 560, 2016).....	12
Fig. 2. 2. Thermal cracker de una etapa.	13
Fig. 2. 3. Thermal cracker de dos etapas.	14
Fig. 2. 4. Un coquizador retardado (delayed coker) (Jones & Pujadó, 2006).	15
Fig. 3. 1. Esquema simplificado de la cinética química para la reacción de desintegración térmica del petróleo.....	18
Fig. 3. 2. Mecanismo de reacción generalizado para el ensuciamiento (Coletti et al., 2015).	26
Fig. 3. 3. Perfil de velocidad turbulento dentro del tubo y representación del coque (a). Perfil de velocidad de la subcapa viscosa con coque (b). Esquema de coque (no escalado).....	27
Fig. 3. 4. Capa de ensuciamiento que crece a lo largo del tubo (no a escala).	29
Fig. 3. 5. Curvas TBP para alimentaciones con diferente gravedad API (Sawarkar et al., 2007).....	30
Fig. 3. 6. Gráfica de superficie para TBP.....	30
Fig. 4. 1. Malla del tubo usada para las simulaciones numéricas.....	34
Fig. 4. 2. Variación de la densidad del residuo de vacío (RV) del petróleo Arabian light con la temperatura.....	36
Fig. 4. 3. Variación de la viscosidad del residuo de vacío (RV) del petróleo Arabian light con la temperatura.....	36
Fig. 4. 4. Variación del calor específico del residuo de vacío (RV) del petróleo Arabian light con la temperatura.....	37
Fig. 4. 5. Variación de la conductividad térmica del residuo de vacío (RV) del petróleo Arabian light con la temperatura.....	37
Fig. 4. 6. Malla dinámica al principio (a) y al final del proceso (b).....	39
Fig. 4. 7. Algoritmo del proceso de desintegración térmica del petróleo y ensuciamiento por coque en la superficie interior del tubo.....	41
Fig. 5. 1. Comparación del perfil de velocidad estimado por CFD y los datos experimentales para flujo turbulento de Laufer (Laufer, 1952) ($Re = 500,000$).....	43

Fig. 5. 2. Comparación de la caída de presión estimada por CFD y por la correlación para flujo turbulento.	43
Fig. 5. 3. Perfil y contornos de la temperatura del petróleo.	45
Fig. 5. 4. Perfil y contornos de la fracción masa del coque.....	46
Fig. 5. 5. Perfil y contornos de la fracción masa del destilado.....	47
Fig. 5. 6. Crecimiento de la capa de ensuciamiento.....	48
Fig. 5. 7. Perfiles de velocidad de flujo de masa de petróleo.....	49
Fig. 5. 8. Perfiles de temperatura en la interfaz petróleo-capa de ensuciamiento (temperatura de película del petróleo).....	50
Fig. 5. 9. Perfiles de la razón de resistencias térmicas.	50
Fig. 5. 10. Perfiles del coeficiente convectivo de transferencia de calor del flujo.	51
Fig. 5. 11. Perfiles de la velocidad de coquización.	52
Fig. 5. 12. Perfiles de la temperatura de metal del tubo (TMT).....	53
Fig. 5. 13. Temperatura de metal del tubo máxima contra el tiempo en la salida del tubo.....	54
Fig. 5. 14. Contornos de velocidad en el tubo a lo largo del tiempo de operación.	56
Fig. 5. 15. Contornos de temperatura en el tubo a lo largo del tiempo de operación.....	57
Fig. 5. 16. Perfiles de velocidad a lo largo del tiempo de operación en la salida del tubo.....	57

LISTA DE TABLAS

Tabla 3. 1. Constantes cinéticas para las reacciones. 19

Tabla 4. 1. Fracción masa de los pseudo-componentes a la entrada del tubo. 34

NOMENCLATURA

A, B	parámetros característicos para las reacciones
C_{coque}	concentración de coque, kg m^{-3}
c_p	calor específico del fluido, $\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
$c_{p,fl}$	calor específico de la capa de ensuciamiento, $\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
D	diámetro del tubo, m
D_i	difusividad de masa del pseudo-componente i , $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
G_k	velocidad de producción de k , $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-3}$
G_ω	velocidad de producción de ω , $\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-2}$
h	coeficiente convectivo de transferencia de calor del flujo, $\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$
k	conductividad térmica del fluido, $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$ o energía cinética turbulenta, $\text{m}^2 \text{s}^{-2}$
K_c	coeficiente global de transferencia de masa, m s^{-1}
k_{fl}	conductividad térmica de la capa de ensuciamiento, $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
k_{eff}	conductividad térmica efectiva, $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
k_t	conductividad térmica turbulenta, $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
k_{1-6}	constantes de velocidad de reacción, s^{-1}
L	longitud del tubo, m
m_{fr}	velocidad de flujo de masa, $\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$
p	presión, Pa
R	radio del tubo, m o constante universal de los gases, $\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$
R_{cond}	resistencia térmica por conducción, K W^{-1}

R_{conv}	resistencia térmica por convección, $K W^{-1}$
Re	número de Reynolds
Sc	número de Schmidt
Sh	número de Sherwood
S_i	término fuente del pseudo-componente i , $kg m^{-3} s^{-1}$
t	tiempo, s
T	temperatura, K
T_f	temperatura de película del fluido, K
TMT	temperatura de metal del tubo, K
TMT_m	temperatura de metal del tubo máxima, K
$TMT_{m,limite}$	temperatura de metal del tubo máxima límite, K
u^+	cociente de velocidad en el perfil de velocidad universal
\vec{v}	vector de velocidad, $m s^{-1}$
$v_{ave}(x)$	velocidad promedio en x , $m s^{-1}$
v_{max}	velocidad máxima en x , $m s^{-1}$
v_x	velocidad en x , $m s^{-1}$
x	posición en x , m
$X_{cr}(x)$	velocidad de coquización, $kg m^{-2} s^{-1}$
y	posición en y , m
Y_i	fracción masa del pseudo-componente i
Y_k	velocidad de destrucción de k , $kg m^{-1} s^{-3}$
Y_ω	velocidad de destrucción de ω , $kg m^{-3} s^{-2}$
y^+	distancia en el perfil de velocidad universal

Letras griegas

$\Delta\varepsilon_{fl}(x)$	incremento del espesor local de la capa de ensuciamiento, m
$\varepsilon_{fl}(x)$	espesor local de la capa de ensuciamiento, m
μ	viscosidad dinámica del fluido, Pa s
μ_{ef}	viscosidad efectiva, Pa s
μ_t	viscosidad turbulenta, Pa s
ρ	densidad del fluido, kg m ⁻³
ρ_{fl}	densidad de la capa de ensuciamiento, kg m ⁻³
σ_k	número de Prandtl turbulento para k
σ_ω	número de Prandtl turbulento para ω
ω	velocidad de disipación específica de la energía cinética turbulenta, s ⁻¹

CAPÍTULO I

INTRODUCCIÓN

1.1. ANTECEDENTES

Dado que el petróleo se compone de una mezcla compleja de hidrocarburos, muchos de los cuales se desconocen, es difícil predecir las reacciones reales que se producen para cada una de las especies químicas reales. Lejos de eludir este problema muchos autores en la literatura consideran grupos de moléculas que representen el petróleo y que logren tener un comportamiento representativo, llamados pseudo-componentes. Köseoglu y Phillips [1–4] presentaron tres modelos cinéticos (modificados posteriormente por Mendonça Filho [5]) con un grupo de siete pseudo-componentes (destilado, saturados, aromáticos, resinas, asfaltenos solubles, asfaltenos en mesofase y coque) para hidrocraqueo catalítico de Athabasca bitumen. Las constantes de velocidad de reacción fueron representadas por una expresión tipo Arrhenius. Las energías de activación y los factores de frecuencia se determinaron para cada modelo de reacción propuesto. Wiehe [6] definió los asfaltenos como una porción del petróleo, insolubles en compuestos alifáticos, pero solubles en disolventes aromáticos tales como tolueno. Los asfaltenos son una mezcla de diversos compuestos químicos, conteniendo: carbono, hidrógeno, azufre, nitrógeno, oxígeno, y una pequeña cantidad de vanadio y níquel [7]. La fórmula química aproximada de asfaltenos con un peso molecular promedio de 3000 Da es $C_{205}H_{236}S_7O_3N_2$ [6]. La precipitación de asfaltenos está en función de las condiciones de operación, principalmente la temperatura y la composición [8]. Por cambios en la temperatura, presión, pH, régimen de flujo, efectos

de pared, y la composición del petróleo crudo, los componentes del asfalteno pueden segregarse, por lo tanto, la formación de coque se inicia por la precipitación de asfaltenos [9].

Un problema crónico que generalmente se encuentra en la industria de la refinación del petróleo, es la formación de coque y como consecuencia ensuciamiento dentro de los tubos de los calentadores a fuego directo, causado por una combinación de temperatura de funcionamiento alta, tiempo de residencia prolongado e inestabilidad inherente del petróleo. Este problema implica bajos rendimientos de operación en estos equipos y paros no programados para su limpieza. Por ello es importante entender el comportamiento de depósito de estas partículas en la pared interna de los tubos del reactor. En este sentido existen en la literatura una serie de trabajos que se han concentrado en experimentar y simular calentadores a fuego directo para los procesos de desintegración térmica de hidrocarburos, muchos de ellos de manera tradicional, enfocando sus esfuerzos en resolver las ecuaciones diferenciales ordinarias o parciales con programas de su autoría o comerciales, tanto del lado proceso, como el lado de la combustión. En la actualidad, y con la evolución de las computadoras, muchos otros autores han hecho estas investigaciones mediante la dinámica de fluidos computacional CFD, estudiando de manera rigurosa el lado de la combustión, pero en lado del proceso se ha limitado solo a secciones de la tubería, determinado campos de temperatura, velocidad y concentración de especies, pero nunca el depósito y acumulación en las paredes internas del coque en estado sólido. En este sentido, los trabajos revisados se presentan a continuación.

Skogestad et al. [10] desarrollaron un programa para simular un horno de coquización retardada. Estudiaron los efectos del depósito de coque en la pared de los tubos para maximizar el tiempo de operación. Ellos contemplaron el cambio de fase del petróleo en la tubería y el equilibrio vapor-líquido.

Takatsuka et al. [11] propusieron un modelo de ensuciamiento tubular de un horno de conversión de residuos, mediante el modelado de la sedimentación del precursor de coque. Los resultados se validaron de una planta piloto y una unidad comercial.

Plehiers et al. [12] simularon el craqueo de etano utilizando un enfoque riguroso, donde el reactor y las simulaciones de coquización se acoplaron con un modelo de simulación para la transferencia de calor radiante en el horno, ellos usaron el método de la zona [13] para resolver el modelo de radiación. Mediante sus simulaciones obtuvieron las temperaturas de los gases de combustión en el horno como función del tiempo, así como los perfiles de presión, temperatura del gas de proceso (etano) y el espesor de la capa de coque en el reactor para diferentes periodos de operación, sin embargo, dadas sus limitaciones de computo los tiempos de paso en sus simulaciones fueron relativamente grandes.

Martin y Barletta [14] presentan dos casos dos estudios de hornos de desintegración térmica de petróleo. Describen la operación de estos hornos y destacan algunos de los problemas que causan una rápida coquización, y en consecuencia paradas no programadas.

Heynderickx et al. [15] desarrollaron un modelo de dinámica de fluidos computacional (CFD) 3-D mediante un esquema de volumen finito para simular la desintegración térmica de nafta, acoplando el modelo del horno mediante la transferencia de calor radiativo con el modelo de reactor. Se utilizaron cinéticas de reacción detalladas para las reacciones de craqueo de nafta en los tubos y un mecanismo de reacción de cinco pasos para la combustión. Su objetivo fue determinar los perfiles de concentración, el patrón de flujo de los gases de combustión y la transferencia de calor en el horno, así como la velocidad de coquización en los tubos del reactor, pero sin considerar el crecimiento dinámico de coque en estado sólido y su efecto en la temperatura del metal del tubo.

Souza et al. [16] desarrollaron un modelo numérico para flujo monofásico (CFD) dentro de las tuberías de los calentadores a fuego directo para el refinado del petróleo. Las ecuaciones de flujo que rigen este fenómeno se integraron numéricamente utilizando un esquema de volumen finito. Su objetivo fue determinar las condiciones operativas que pueden reducir la formación de coque disuelto en el fluido (coque de bulto), debido a la desintegración térmica de la alimentación. Con el fin de predecir la formación de coque, el modelo utiliza un diagrama ternario [17] para probar si el pseudo-componente asfalteno se precipita (sólo

el asfalteno puede conducir a la formación de coque). Un detalle de este modelo es que no considera la importancia del refinado de la malla cerca de la pared para contemplar los efectos por la formación de la capa límite, lo cual implica una condición importante a valorar en el presente trabajo dado que la transferencia de calor se da desde la pared del tubo hacia al petróleo que fluye. Tampoco consideran el proceso de depósito y acumulación del coque disuelto sobre la pared del tubo.

De Schepper et al. [18] desarrollaron una simulación acoplada de CFD 3-D en el paquete comercial Ansys-Fluent®, tanto de lado del gas de combustión como del gas de proceso de la sección de convección de un desintegrador térmico con vapor. Ellos simularon la transferencia de calor radiativa en la sección de convección utilizando el modelo de ordenadas discretas (DOM, *Discrete Ordinate Model*). Su estudio se concentró principalmente en determinar el campo de flujo de los gases de combustión en el horno y los campos de temperatura en los tubos; sin embargo, ellos no hacen mención del fenómeno de coquización dentro de los tubos.

Bayat et al. [19] desarrollaron un modelo CFD en 2-D para estudiar el comportamiento del ensuciamiento de los precalentadores de petróleo crudo. El petróleo crudo se supone que está compuesto por asfaltenos y sal, y las reacciones de depósito de coque y sal se definieron en el paquete Ansys-Fluent® usando el modelo de transporte de especies. Sin embargo, para interpretar el ensuciamiento ellos modifican las propiedades reológicas del fluido cerca de la pared, y no presentan la formación del ensuciamiento por coque como un sólido, por lo cual no evalúan el efecto de la capa de ensuciamiento en el incremento de la temperatura de metal del tubo con el tiempo.

Li et al. [20] simularon la desintegración térmica de dicloruro de etileno por medio de Matlab®. Predijeron la capa de coque sobre la superficie interna de un serpentín-reactor a lo largo del tiempo. Sin embargo, el estudio se realizó en 1D y no contempla los efectos radiales, como los perfiles radiales de temperatura, velocidad y especies.

Fontoura et al. [21] modelaron por CFD la desintegración térmica de petróleo y el cambio de fase dentro de un tubo de un calentador a fuego directo. Los resultados mostraron solamente el campo de temperatura y las velocidades de la corriente. La formación de coque no se discutió en los resultados y conclusiones. Este estudio fue extendido por Li et al. [22], ellos desarrollaron un modelo de tres fases gas-líquido-sólido en 3D mediante CFD. Se predijo el cambio de fase, las especies debido a las reacciones dentro del tubo para diferentes tipos de petróleo, los campos de temperatura, el flujo de fluido, la separación de líquido-gas y la formación de coque disperso (coque de bulto), sin embargo, el crecimiento dinámico de la capa de ensuciamiento sobre la superficie del tubo no es considerado.

Como se puede observar, no se considera la formación de la capa de ensuciamiento en los trabajos anteriores, por lo que no es posible evaluar el efecto real de la temperatura externa del tubo, y en consecuencia, no es posible calcular el tiempo en el que se alcanza el límite de temperatura metalúrgica. Por lo tanto, se propone el siguiente planteamiento del problema así como la justificación de las áreas de oportunidad que serán abordadas en este trabajo.

1.2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

En la industria petrolera los hornos o calentadores a fuego directo, son equipos utilizados para dar valor agregado a residuos de petróleo, con la finalidad de obtener destilados medios y ligeros. Estos residuos que alimentan al calentador son desintegrados térmicamente. Este proceso de desintegración ocurre como consecuencia de altas temperaturas. Estas son generadas debido al calor que llega a los tubos del calentador, los cuales están sometidos a radiación por fuego directo, y a tiempos de residencia considerables. Los tubos del reactor se arman a modo de serpentín dentro del calentador, siendo el lugar donde ocurre una serie de reacciones químicas, así como de otros fenómenos físicos importantes del proceso como cambio de fase. Estos fenómenos generan recurrentemente formación de coque que, con el tiempo, se va depositando y acumulando en la pared interna de los tubos, formando progresivamente una capa sólida. Esta capa de coque en estado sólido (capa de ensuciamiento) se adhiere a la superficie interior del tubo e inhibe la transferencia de calor, induciendo un sobrecalentamiento en el exterior del metal

del tubo, que en ocasiones, pudiera alcanzar el límite de temperatura metalúrgica [14,23], provocando un paro no programado del equipo o inclusive una posible falla mecánica del tubo.

1.3. JUSTIFICACIÓN

El estudio del ensuciamiento de los equipos de intercambio de calor en la industria de la refinación, sigue siendo un aspecto de sumo interés a valorar, ya que esto permite identificar las variables involucradas en el fenómeno, de tal forma que estas puedan controlarse para incrementar los rendimientos de estos equipos. Se sabe que estos estudios han sido abordados desde diferentes enfoques y métodos, que han resultado ser más o menos precisos unos de otros, de acuerdo a los objetivos buscados o limitaciones propias de los modelos y técnicas empleadas. En este sentido podemos identificar el enfoque convencional y el enfoque de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD), ambos abordados en los trabajos comentados previamente. Se observó que estos enfoques presentan una serie de problemáticas que se mencionan a continuación:

- En lo que se refiere a los trabajos que utilizan el enfoque convencional. Si bien estos trabajos tienen el potencial de poder simular en su totalidad un equipo de transferencia de calor sujeto a ensuciamiento, contemplando los fenómenos como el transporte de momento, masa, energía y reacciones en un serpentín-rector. Estos están limitados en cuanto a la capacidad de representar el fenómeno real, debido a que generalmente tratan el flujo como tipo pistón unidimensional, sin considerar en consecuencia la presencia de la capa límite. Esto implica que en un flujo reactivo no contemplan los perfiles radiales de temperatura, especies y velocidad.
- Respecto a los trabajos desarrollados mediante la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD). La ventaja de los modelos CFD multidimensionales para flujo reactivo, sobre el modelado unidimensional convencional, se sustenta en la capacidad de simular tecnologías mejoradas de reactores (serpentín-reactor), y tener en cuenta la temperatura radial no uniforme y perfiles de especies. Sin embargo, si bien incluyen la formación de ensuciamiento por coque mediante un enfoque

Euleriano-Euleriano, donde se trata la fase de partículas (coque) como un continuo y se calcula sus ecuaciones de gobierno en un volumen de control. No se contempla el depósito y acumulación del coque disperso sobre las paredes de la tubería de un serpentín-reactor, de tal manera que forme una capa de coque en estado sólido que crezca con el tiempo. De este modo, en estos trabajos se descarta la caída de presión, el aumento de velocidad del fluido por la reducción del área transversal de la tubería y el aumento de la temperatura del metal del tubo por la consecuente inhibición de transferencia de calor. Por ello, aunque en estos trabajos queda demostrado el potencial de los modelos de CFD, no pueden usarse como una herramienta de investigación en la práctica industrial.

Por lo anterior, en este trabajo se presenta el estudio del depósito de una capa sólida de coque (capa de ensuciamiento) en la superficie interna de un tubo de un calentador petroquímico a fuego directo, debido al proceso de desintegración térmica del petróleo. El estudio se llevará a cabo a través de la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) en un dominio computacional 2D. La capa de ensuciamiento en la superficie interna del tubo, se calculará a partir de los fenómenos químicos y físicos acoplados por la técnica de malla dinámica. El método de malla dinámica será programado mediante Funciones Definidas por el Usuario (*User-Defined Functions*, UDFs), para permitir que crezca la capa de ensuciamiento en la superficie interna del tubo. El modelado de la capa de ensuciamiento en la superficie interna del tubo permitirá predecir la temperatura en la superficie del tubo, conocida como la temperatura del metal del tubo (TMT). Además, la TMT predicha se usará para identificar los "puntos calientes" y las temperaturas cercanas al límite de temperatura metalúrgica. De tal forma que el modelo que se empleará en este trabajo permitirá predecir el tiempo operativo máximo, sin comprometer las propiedades metalúrgicas del material del tubo de los calentadores a fuego directo, de acuerdo con los estándares internacionales para el diseño del proceso de desintegración térmica del petróleo en la industria de la refinación. Se determinará también el campo temperatura y velocidad del petróleo, así como la concentración de las especies (pseudo-componentes) por la desintegración térmica de petróleo dentro de los tubos.

1.4. OBJETIVOS

1.4.1. Objetivo general

Predecir el ensuciamiento por coque en la superficie interna de un tubo de un calentador petroquímico a fuego directo, mediante el estudio de su formación y acumulación siguiendo un enfoque de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD), a través del acoplamiento de la técnica de malla dinámica para determinar la temperatura del metal del tubo (TMT), identificar "puntos calientes", calcular las temperaturas cercanas al límite de temperatura metalúrgico y estimar el tiempo operativo máximo.

1.4.2. Objetivos particulares

- Proponer un modelo de ensuciamiento por coque, para determinar el depósito, acumulación y paulatino crecimiento de la capa de coque sólido (capa de ensuciamiento) en el interior de un tubo de un calentador petroquímico a fuego directo.
- Implementar un modelo 2-D de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) evaluando la transferencia de masa, momento y energía, utilizando un modelo de cierre (modelo de turbulencia), para determinar perfiles de velocidad, campo de temperaturas y perfiles de concentración de los componentes de la desintegración térmica del petróleo en el tubo.
- Acoplar el modelo de ensuciamiento con la técnica de malla dinámica para determinar el mecanismo de crecimiento de la capa de coque sólido (capa de ensuciamiento) y predecir a lo largo del tubo su depósito y acumulación en función del tiempo.
- Calcular la temperatura de metal del tubo (TMT) para identificar posibles "puntos calientes" y determinar el tiempo máximo de operación, de acuerdo a estándares internacionales.

1.5. HIPÓTESIS

Mediante un nuevo enfoque de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD), es posible predecir el ensuciamiento por coque en la superficie interna de un tubo de un calentador petroquímico a fuego directo, de los fenómenos químicos y físicos acoplados por la técnica de malla dinámica, para determinar la temperatura en la superficie del tubo y el tiempo operativo máximo.

CAPÍTULO II

MARCO TEÓRICO

2.1. INTRODUCCIÓN

En la industria petrolera los hornos o calentadores a fuego directo, son equipos utilizados para dar valor agregado a residuos de petróleo, con la finalidad de obtener destilados medios y ligeros. Estos residuos que alimentan al calentador son desintegrados térmicamente. Este proceso de desintegración ocurre como consecuencia de altas temperaturas. Estas son generadas debido al calor que llega a los tubos del calentador, los cuales están sometidos a radiación por fuego directo, y a tiempos de residencia considerables. Los tubos del reactor se arman a modo de serpentín dentro del calentador, siendo el lugar donde ocurre una serie de reacciones químicas, así como de otros fenómenos físicos importantes del proceso como cambio de fase. Estos fenómenos generan recurrentemente formación de coque que, con el tiempo, se va depositando y acumulando en la pared interna de los tubos, formando progresivamente una capa sólida. Esta capa de coque en estado sólido se adhiere a la superficie interior del tubo e inhibe la transferencia de calor, induciendo un sobrecalentamiento en el exterior del metal del tubo, que en ocasiones, pudiera alcanzar el límite de temperatura metalúrgica [14,23], provocando un paro no programado del equipo o inclusive una posible falla mecánica del tubo.

En este trabajo se presenta un estudio del depósito de la capa de ensuciamiento en la superficie interna de un tubo de un calentador petroquímico debido al proceso de

desintegración térmica del petróleo. El estudio se lleva a cabo mediante un modelo de dinámica de fluidos computacional transitorio en un dominio computacional 2D. Se obtiene la acumulación de coque y la capa de ensuciamiento que va creciendo en la superficie interna de un tubo de un calentador a fuego directo. La capa de ensuciamiento en la superficie interna del tubo se predice por la complejidad de los fenómenos químicos y físicos acoplados por la técnica de malla dinámica. El método de malla dinámica está programado por las funciones definidas por el usuario (UDFs) para permitir que crezca la capa de ensuciamiento en la superficie interna del tubo. El modelado de la capa de ensuciamiento en la superficie interna del tubo permite predecir la temperatura en la superficie del tubo, conocida como temperatura del metal del tubo (TMT). Además, el TMT predicho se utiliza para identificar los "puntos calientes" y las temperaturas que están cerca del límite de temperatura metalúrgica. Asimismo, el modelo utilizado en este trabajo predice el tiempo máximo de operación, de acuerdo a los estándares internacionales para el diseño del proceso de desintegración térmica del petróleo en los calentadores a fuego directo para la industria de refinación, sin comprometer las propiedades metalúrgicas del material del tubo de los calentadores. Finalmente, se logra una predicción detallada de la capa de ensuciamiento con este nuevo enfoque que considera: la malla dinámica mediante dinámica de fluidos computacional, el espesor de la capa de ensuciamiento con los efectos de la temperatura del metal del tubo, la hidrodinámica del flujo, reacciones químicas y transferencia de masa.

2.2. CALENTADORES A FUEGO DIRECTO

La mayoría de las plantas químicas y todas las refinerías de petróleo contienen calentadores a fuego directo como un medio para proporcionar energía térmica en un sistema. Debido a que el equipo utiliza una fuente externa de combustible por lo general es apoyada y reforzada por un sistema de intercambio de calor para reducir al mínimo la cantidad de combustible requerido. En general, los calentadores a fuego directo se dividen en dos categorías principales: tipo horizontal y de tipo vertical. Este proyecto de Tesis está enfocado en los de tipo horizontal.

El calentador tipo horizontal por lo general significa un calentador de tipo caja con los tubos que están posicionados horizontalmente a lo largo de las paredes (ver Fig. 2.1). También se muestran los diferentes elementos que constituyen este equipo. Generalmente este tipo de calentadores son los preferidos para el calentamiento de petróleo crudo.

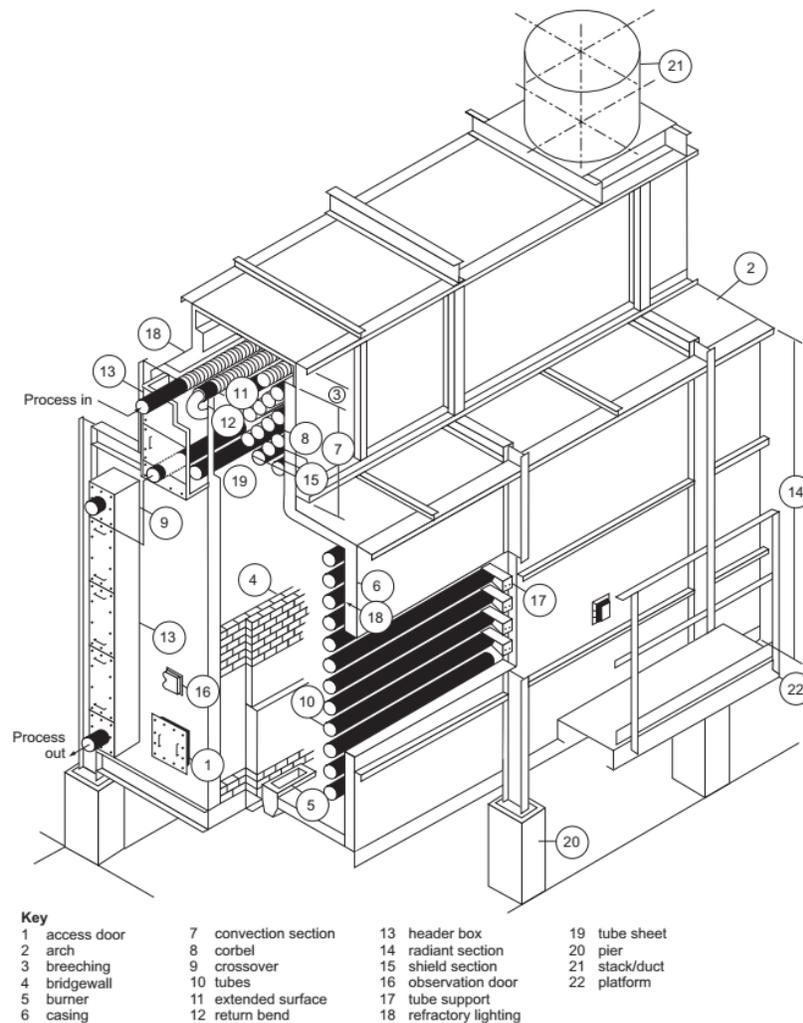


Fig. 2. 1. Calentador tipo horizontal [24].

2.3. DESINTEGRACIÓN TÉRMICA DEL PETRÓLEO

En la industria de la refinación del petróleo, es común utilizar calentadores a fuego directo para desintegrar térmicamente residuos de petróleo. Existen tres procesos: El *visbreaker*, cuyo objetivo es procesar residuos de vacío (residuos cortos) para bajar la viscosidad del petróleo. El *thermal cracker* consiste en procesar residuos atmosféricos (residuos largos)

para obtener productos medios y ligeros. La coquización retardada (*delayed coking*), tiene como objetivo principal someter residuos atmosféricos y de vacío a altas temperaturas para desintegrarlos térmicamente, para obtener destilados medios, ligeros y coque de petróleo. Específicamente la desintegración térmica consiste en convertir la alimentación de petróleo o residuos (ya sean residuos atmosféricos o de vacío) solamente por calor a alta temperatura en productos de calidad superior, tales como la nafta y destilados medios. Es decir, ningún catalizador o agentes químicos se utilizan en la conversión en este proceso de refinado.

En una refinería sencilla sin instalaciones de destilación a vacío, el residuo de la destilación atmosférica del petróleo crudo normalmente hierve por encima de $343\text{ }^{\circ}\text{C}$ o $371\text{ }^{\circ}\text{C}$, lo que constituye el grueso del combustóleo pesado producido. En los casos donde se desea un incremento de la producción de los destilados ligeros y medios a expensas del combustóleo, la desintegración térmica de una etapa del residuo de petróleo es una solución fácil y económica. El residuo se desintegra en un calentador especialmente diseñado (calentador a fuego directo), el efluente del calentador se enfría y se envía a un fraccionador, a veces con un pre-flash y los productos de desintegración tales como gases ligeros, nafta, gasóleo (diésel) y residuos se separan de la manera convencional. Por este proceso aproximadamente un 20% de los residuos de alimentación pueden ser convertidos en productos más ligeros, principalmente gasóleo (diésel). La Fig. 2.2 muestra una típica etapa de desintegración térmica [25].

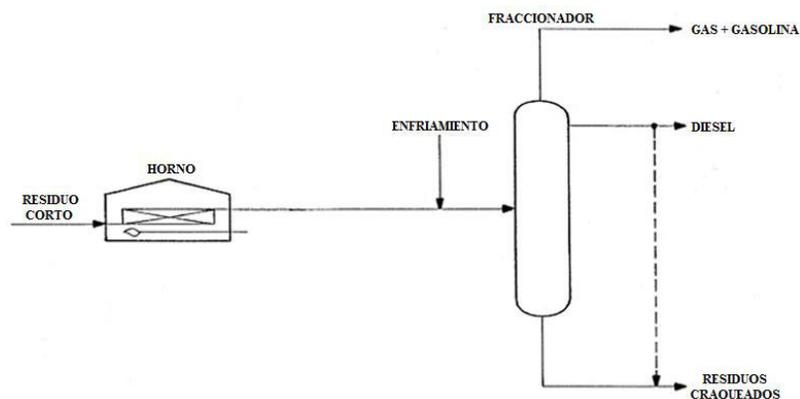


Fig. 2. 2. *Thermal cracker* de una etapa.

Para aumentar la producción de diésel, un proceso algo más complicado puede ser aplicado. Sin embargo, la alimentación de residuos en este caso se desintegran en el primer calentador y el efluente es flasheado, los vapores calientes del tambor de flasheo se encaminan a un torre de fraccionamiento donde el gasóleo pesado se recupera como el producto de fondo. Este a su vez es desintegrado en un segundo calentador y en condiciones más severas para producir cantidades adicionales de productos destilados ligeros y gasóleo. Normalmente el primer calentador, con residuos, opera entre 103.4 y 137.9 kPa de presión, y temperaturas del petróleo a la entrada y a la salida del serpentín de 232 y 482 °C, respectivamente. El segundo calentador, con gasóleo, opera alrededor de 1.724 y 2.068 MPa y a temperatura de salida del serpentín de 499 °C. El proceso descrito es llamado desintegración térmica de dos etapas y se muestra en la Fig. 2.3 [25,26].

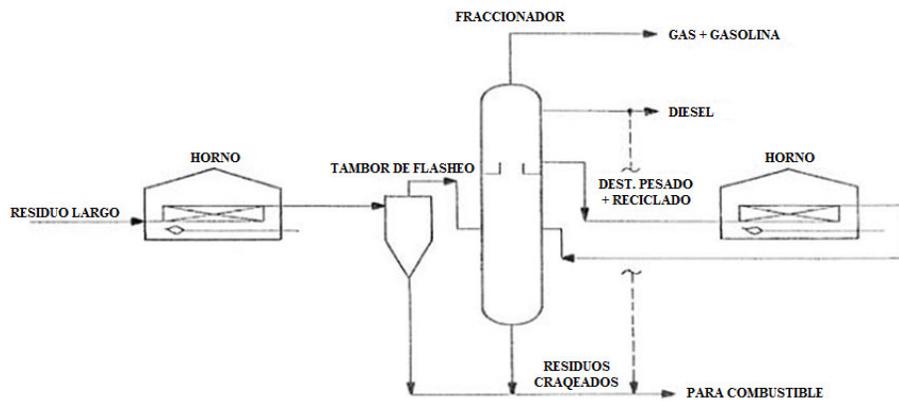


Fig. 2. 3. *Thermal cracker* de dos etapas.

En el *delayed coking* (Fig. 2.4) la alimentación de combustóleo o petróleo pesado se dirige a un horno de desintegración, similar a otros procesos de desintegración térmica. El efluente del horno se envía a uno de un conjunto de varios tambores de coque sin enfriarse. Skogestad et al. [10] indican que este proceso es operado a la entrada del serpentín de 325 a 375 °C, una velocidad del residuo de petróleo entre 2 a 3 m/s y una presión de 2.3 a 3 MPa. A la salida el efluente normalmente está de 450 a 500 °C, 0.5 a 1 MPa, pudiendo alcanzar velocidades de hasta 40 m/s como un flujo de dos fases; el tambor de coque se llena en aproximadamente 24 horas. Los vapores que salen de la parte superior del tambor mientras se llenan se dirigen al fraccionador, donde se fraccionan en los productos destilados. El período de residencia muy largo del efluente en los tambores de coque resulta en la

destrucción completa de las fracciones pesadas, y un residuo sólido rico en carbono se deja en el tambor como coque.

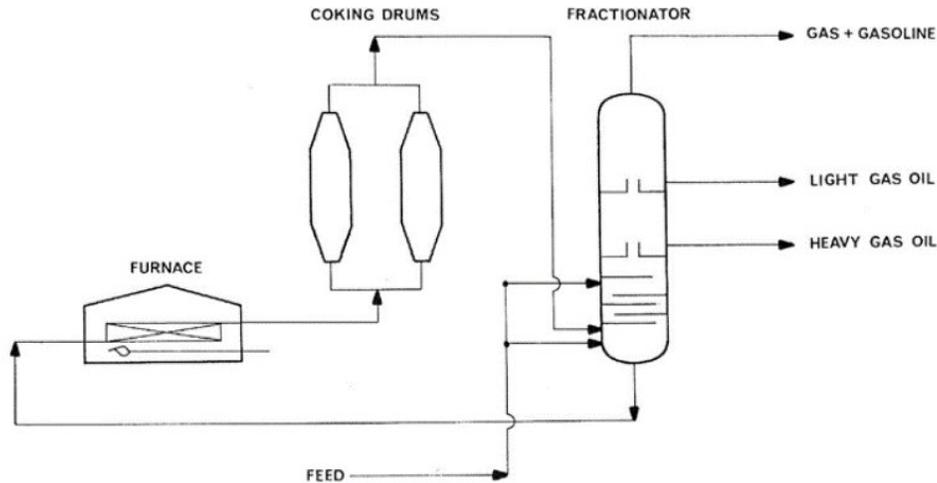


Fig. 2. 4. Un coquizador retardado (*delayed coker*) [25].

Debido a la desintegración térmica del petróleo en los calentadores a fuego directo, es común tener depósitos de coque en el interior de estos tubos, producto de reacciones secundarias de los componentes de carbono del petróleo, especialmente cuando hay un cambio de fase (de líquido a sólido). Los fenómenos son complejos y la mayoría de los detalles del proceso de sedimentación de coque son poco comprendidos. Los depósitos de coque pueden provocar una transferencia de calor ineficiente, a veces se requiere el apagado de los equipos con el fin de eliminar el coque depositado en el interior de los tubos. Se sabe que estos depósitos de coque van formando progresivamente una capa que puede alcanzar un espesor de 5 a 15 mm antes de que la operación del equipo se detenga, dependiendo del tipo de materia prima de alimentación y la gravedad específica del petróleo [27]. La comprensión de cómo se forman estos depósitos y de las variables que afectan en la formación de coque, puede conducir a un mejor desempeño del equipo.

CAPÍTULO III

MODELOS MATEMÁTICOS

3.1. INTRODUCCIÓN

El modelo desarrollado para predecir la formación y acumulación del coque y la capa de ensuciamiento en la superficie interna del tubo de un calentador a fuego directo, tiene en cuenta las siguientes suposiciones:

- Estado transitorio.
- Flujo de una sola fase.
- El petróleo siempre es líquido a altas temperaturas.
- El flujo de petróleo a la entrada de la tubería del calentador a fuego directo está completamente desarrollado.
- Aunque el serpentín de los calentadores a fuego directo está sometido a diferentes flujos de calor, una buena aproximación para predecir el potencial de coquización y en consecuencia de ensuciamiento, es suponer un flujo de calor pico máximo como constante en la pared del tubo, lo que es aceptable para el diseño de los calentadores a fuego directo [14].
- Las propiedades físicas (densidad, viscosidad, calor específico y conductividad térmica) varían solo según la temperatura.
- El petróleo puede ser representado por siete pseudo-componentes, de acuerdo al modelo modificado de Köseoglu y Phillips [1–5], en el que el petróleo estuvo

representado por S.A.R.A. (saturados, aromáticos, resinas, asfaltenos) y los pseudo-componentes destilado, asfaltenos en mesofase y el coque, que se introdujeron para tener en cuenta la reacción térmica.

- A pesar de que es posible la formación de asfaltenos en mesofase y posteriormente coque (disuelto en el fluido), son considerados como partículas microscópicas portadas por el fluido, por lo que no afectan la cinética química utilizada.
- El depósito de la capa de coque sólido y el progresivo crecimiento, depende de la concentración del coque que está localizado dentro de la subcapa viscosa en la capa límite hidrodinámica.

3.2. FLUJO COMPLETAMENTE DESARROLLADO

Para el flujo turbulento completamente desarrollado, el perfil de velocidad axial a la entrada del tubo está dado por la siguiente ecuación. Esta condición fue obtenida través del uso de una solución empírica/analítica basada en la teoría de Prandtl cerca de la pared [28]:

$$v_x = 12.85 \sqrt{\frac{KR}{2\rho}} + \sqrt{\frac{KR}{0.32\rho}} \ln \left(\frac{R - \text{abs}(y)}{26 \frac{\mu}{\rho} \sqrt{\frac{2\rho}{KR}}} \right) \quad (3.1)$$

y es la posición en el radio del tubo tomada a partir del centro, R el radio y K es el gradiente de presión determinado por:

$$K = -\frac{dP}{dx} \quad (3.2)$$

Para calcular este perfil de velocidad a la entrada, las propiedades físicas como la densidad ρ y la viscosidad μ son determinadas inicialmente a la temperatura de película del petróleo T_f [29], en función de la temperatura del petróleo en el bulto T_b y la temperatura de pared T_w :

$$T_f = T_b + 0.55(T_w - T_b) \quad (3.3)$$

De tal manera que la caída de presión ΔP se estima usando la ecuación semi-analítica derivada del factor de fricción de Moody [30]:

$$\Delta P = \frac{f \rho v_{prom}^2 L}{4R} \quad (3.4)$$

Donde v_{prom} es la velocidad axial promedio, L es la longitud del tubo, el factor de fricción de Moody f se obtiene por [30]:

$$f = \frac{64}{Re} \quad Re \leq 2000 \quad (3.5)$$

$$f = \frac{0.316}{Re^{0.25}} \quad 3000 \leq Re \leq 20000 \quad (3.6)$$

$$f = \frac{0.184}{Re^{0.2}} \quad Re > 20000 \quad (3.7)$$

3.3. MODELO CINÉTICO QUÍMICO DE LA DESINTEGRACIÓN TÉRMICA DEL PETRÓLEO

Con el fin de predecir la desintegración térmica de petróleo, se utiliza un grupo de siete pseudo-componentes de acuerdo con la cinética química presentada por Köseoglu y Phillips [1–5] (Fig. 3.1).

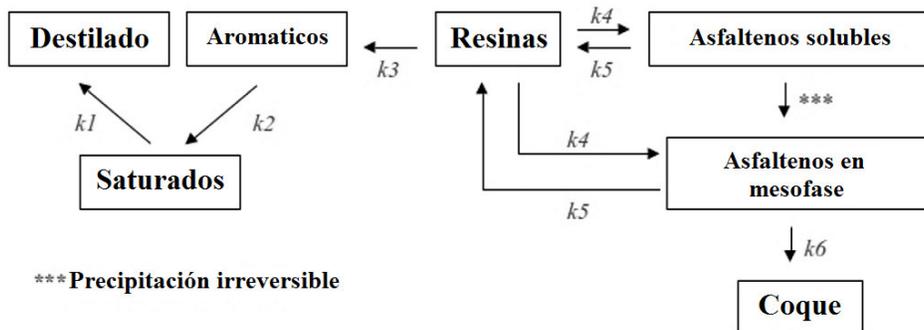


Fig. 3. 1. Esquema simplificado de la cinética química para la reacción de desintegración térmica del petróleo.

De esta propuesta de reacción pseudo-química se deducen términos cinéticos fuente para cada uno de los pseudo-componentes [5]:

$$S_{Destilado} = \frac{dC_{Destilado}}{dt} = k_1 Y_{sat} \rho \quad (3.8)$$

$$S_{Saturados} = \frac{dC_{Saturados}}{dt} = k_2 Y_{arom} \rho - k_1 Y_{sat} \rho \quad (3.9)$$

$$S_{Aromaticos} = \frac{dC_{Aromaticos}}{dt} = k_3 Y_{res} \rho - k_2 Y_{arom} \rho \quad (3.10)$$

$$S_{Resinas} = \frac{dC_{Resinas}}{dt} = k_5 (Y_{asf sol} + Y_{asf meso}) \rho - (k_3 + 2k_4) Y_{res} \rho \quad (3.11)$$

$$S_{Asfaltenos Solubles} = \frac{dC_{Asfaltenos Solubles}}{dt} = k_4 Y_{res} \rho - k_5 Y_{asf sol} \rho \quad (3.12)$$

$$S_{Asfaltenos Mesofase} = \frac{dC_{Asfaltenos Mesofase}}{dt} = k_4 Y_{res} \rho - (k_5 + k_6) Y_{asf meso} \rho \quad (3.13)$$

$$S_{Coque} = \frac{dC_{Coque}}{dt} = k_6 Y_{asf meso} \rho \quad (3.14)$$

Las constantes de la velocidad de reacción se obtienen a partir de la ecuación de Arrhenius [5]:

$$k_i = \frac{1}{3600} \exp\left(A - \frac{B}{RT}\right) \quad (3.15)$$

En esta ecuación A es el factor de frecuencia y B es la energía de activación, los valores de estas constantes cinéticas para cada una de las reacciones se muestran en la Tabla 3.1, R es la constante universal de los gases y T la temperatura del fluido.

Tabla 3. 1. Constantes cinéticas para las reacciones.

Reacción	A	B (J/mol)
1	29.90	175000
2	23.43	136000
3	13.57	85000
4	17.07	96000

5	19.34	103000
6	27.54	168000

3.4. ECUACIÓN DE CONTINUIDAD

La ecuación de conservación de masa o la ecuación de continuidad, se puede escribir de la siguiente manera:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (3.16)$$

El primer término en el lado izquierdo es la tasa de cambio en el tiempo de la densidad. El segundo término describe el flujo neto de masa y se denomina término convectivo.

3.5. MODELO DE TRANSPORTE DE ESPECIES

El transporte de especies se modela por la ecuación de convección-difusión, que es una combinación de las ecuaciones de difusión y de convección. Ésta describe los fenómenos físicos donde la masa, y otras magnitudes físicas, se mueven dentro de un sistema de tubo cilíndrico, debido precisamente a los fenómenos de difusión y convección, a los altos valores del número de Reynolds, la difusión es casi nula. Dependiendo del contexto, a esta misma ecuación se le puede llamar ecuación de transporte de especies, ecuación de convección-difusión o de forma general, ecuación escalar de transporte.

El paquete de Ansys-Fluent® resuelve las ecuaciones de conservación que describen la convección-difusión de especies y sus modelos, y las fuentes de reacción para cada una de las especies o componentes, simulando así la mezcla y el transporte de especies químicas. Reacciones químicas múltiples simultáneas pueden ser modeladas, con reacciones que se producen en el bulto (reacciones volumétricas) y/o sobre la pared o las partículas superficiales y en la región porosa.

Para el presente estudio, de acuerdo a las características de la reacción química y de la correspondiente cinética de desintegración térmica del petróleo, se propone modelar reacciones como volumétricas.

Cuando se requiere resolver las ecuaciones de conservación de especies químicas, Ansys-Fluent®, al dar solución a la ecuación de balance de masa obtiene el campo de la fracción masa local de cada especie Y_i , a través de la solución de una ecuación de convección-difusión para las i -ésimas especies. Esta ecuación de conservación tiene la siguiente forma general [31]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i + S_i \quad (3.17)$$

Donde R_i es la tasa neta de producción de especies i por reacción química y S_i es la velocidad de creación de especies a través de funciones definidas por el usuario (como términos fuente). Una ecuación de esta forma se resolverá para $N - 1$ especies donde N es el número total de especies químicas presentes en el sistema. Dado que la fracción masa de las especies deben sumar la unidad, la fracción masa N -ésima se determina como uno menos la suma de las $N - 1$ fracciones masa resueltas.

En la Ec. (3.17), \vec{J}_i es el flux de difusión de las especies i , que surge debido a los gradientes de concentración y temperatura. Por defecto, Ansys-Fluent® utiliza la aproximación diluida (también llamada ley de Fick) para modelar difusión de masa debido a los gradientes de concentración, en las que el flux de difusión para flujo turbulento se puede describir como [31]:

$$\vec{J}_i = -\left(\rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t}\right) \nabla Y_i - D_{T,i} \frac{\nabla T}{T} \quad (3.18)$$

En esta ecuación $D_{i,m}$ es el coeficiente de difusión de masa para cada una de las especies i o como se les ha llamado con anterioridad, para cada uno de los pseudo-componentes en la

mezcla, $D_{T,i}$ es el coeficiente de difusión térmica (Soret), μ_t es la viscosidad turbulenta y Sc_t es el número de Schmidt turbulento ($\frac{\mu_t}{\rho D_t}$ donde D_t es la difusividad turbulenta).

Siguiendo las mismas suposiciones que establecieron Souza et al. [16], para flujo turbulento, el número de Schmidt efectivo se puede aproximar a la unidad, de la misma manera supusieron también que no existía difusión térmica. La tasa neta de producción de especies i por reacción química R_i no fue considerada dado que se presenta la cinética neta de la desintegración térmica del petróleo por medio de grupos de moléculas como pseudo-componentes, para esto se consideró la velocidad de creación y consumo de las especies o pseudo-componentes mediante términos fuente S_i , los cuales se incorporarán al modelo mediante una UDF. Tal como se mencionó anteriormente el flujo es en estado transitorio, por lo tanto la ecuación de transporte de especies que resolverá Ansys-Fluent® queda de la siguiente forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = \nabla \cdot [(\mu + \mu_t) \nabla Y_i] + S_i \quad (3.19)$$

3.6. ECUACIÓN DE MOMENTO

La conservación del momento en un marco de referencia inercial (que no acelera) está descrita por [32]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\bar{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (3.20)$$

Donde p es la presión estática, $\bar{\tau}$ es el tensor de esfuerzos, y $\rho \vec{g}$ y \vec{F} son la fuerza gravitacional de cuerpo y fuerzas externas de cuerpo, respectivamente. \vec{F} también contiene otros términos fuente que dependen del modelo, tales como las fuentes definidas por el usuario.

El tensor de esfuerzos $\bar{\tau}$ está dado por:

$$\bar{\tau} = \mu_{ef} \left[(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} I \right] \quad (3.21)$$

Donde μ_{ef} es la viscosidad efectiva, I es el tensor unidad y el segundo término de lado derecho es el efecto de la dilatación volumétrica.

Luego al aplicar las suposiciones establecidas para el modelo a la ecuación de conservación de momento, conduce a la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot [(\mu + \mu_t) \nabla \cdot \vec{v}] \quad (3.22)$$

3.7. MODELO DE TURBULENCIA

Para calcular la viscosidad turbulenta, μ_t , se utilizó el modelo de transporte corte-esfuerzo (*shear-stress transport*, SST) k - ω . Este modelo fue desarrollado por Menter [33] para combinar eficazmente la formulación robusta y precisa del modelo k - ω en la región cercana a la pared con la independencia de flujo libre del modelo k - ε en el campo lejano. Para lograr esto, el modelo k - ε se convierte en una formulación k - ω . La energía cinética turbulenta k y la frecuencia turbulenta ω se calculan mediante las siguientes relaciones:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho k) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} k) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + G_k - Y_k \quad (3.23)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \omega) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \omega) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \nabla \omega \right] + G_\omega - Y_\omega \quad (3.24)$$

Donde G_k y G_ω son términos de producción de k y ω e Y_k e Y_ω representan las velocidades de destrucción. σ_k y σ_ω son también los números de Prandtl turbulento para k y ω , respectivamente. La viscosidad turbulenta se calcula como:

$$\mu_t = \alpha^* \rho \frac{k}{\omega} \quad (3.25)$$

El coeficiente α^* amortigua la viscosidad turbulenta causando una corrección por bajo número de Reynolds (*low-Reynolds-number*).

3.8. ECUACIÓN DE ENERGÍA

Ansys-Fluent® resuelve la ecuación de energía de la siguiente forma [31]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot (\vec{v}(\rho E + p)) = \nabla \cdot \left(k_{eff} \nabla T - \sum_i h_i \vec{J}_i + (\bar{\tau}_{eff} \cdot \vec{v}) \right) + S_h \quad (3.26)$$

Donde k_{eff} es la conductividad térmica efectiva ($k + k_t$, donde k es la conductividad térmica del fluido y k_t es la conductividad térmica turbulenta), y \vec{J}_i es el flux de difusión de especies i . Los primeros tres términos de lado derecho de la Ec. (3.26) representan la transferencia de energía debido a la conducción, difusión de especies y disipación viscosa, respectivamente. S_h incluye el calor por reacción química y cualesquiera otras fuentes volumétricas de calor definidas por el usuario.

En la Ec. (3.26) E está dado por:

$$E = h - \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2} \quad (3.27)$$

Por definición la entalpia h del fluido se describe de la siguiente forma:

$$h = u + \frac{p}{\rho} \quad (3.28)$$

De esta manera la Ec. (3.27) toma la forma siguiente:

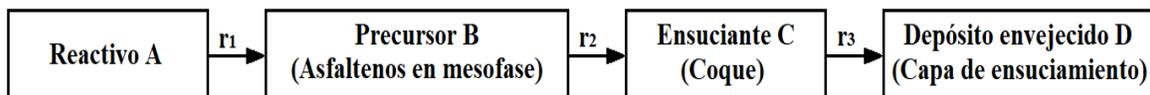
$$E = u + \frac{v^2}{2} \quad (3.29)$$

Dado que el petróleo se considera una sustancia incompresible (líquido), el calor específico $c_v = c_p$, de tal manera que se puede expresar que $du = c_v dT = c_p dT$. La temperatura es estimada por Ansys-Fluent® a partir de la ecuación de conservación de la energía, la cual al aplicar las consideraciones anteriores y las suposiciones establecidas para el modelo se reduce entonces a:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c_p T) + \nabla \cdot (\vec{v} \rho c_p T) = \nabla \cdot (k_{eff} \nabla T) \quad (3.30)$$

3.9. MODELO DE ENSUCIAMIENTO POR COQUE

El modelo se basa bajo el enfoque de Kern y Seaton [34–36], donde la velocidad de ensuciamiento neta es la diferencia entre la velocidad de depósito y la velocidad de remoción, y es el resultado del equilibrio entre las fuerzas desarrolladas en el flujo. Bajo este método, es posible establecer un modelo de reacción-transporte y una velocidad de ensuciamiento, también conocida como velocidad de coquización, X_{cr} , consiste en una fenomenología complicada, que de acuerdo a la evidencia experimental reportada en la literatura, el mecanismo de ensuciamiento sigue un proceso de ensuciamiento de reacción generalizada de tres pasos con transporte molecular [37]. En este estudio, el mecanismo de ensuciamiento está vinculado al modelo cinético químico para la desintegración térmica del petróleo, por lo tanto, los asfaltenos en mesofase y coque (precursor y ensuciante, respectivamente) se producen en la capa límite. Finalmente, el ensuciante se depositará y acumulará en la superficie de transferencia de calor del tubo, de tal manera que se desarrolle a lo largo del tiempo una capa de ensuciamiento (depósito envejecido) con propiedades químicas y físicas, que afectan el rendimiento global del intercambiador de calor, ver Fig. 3.2.



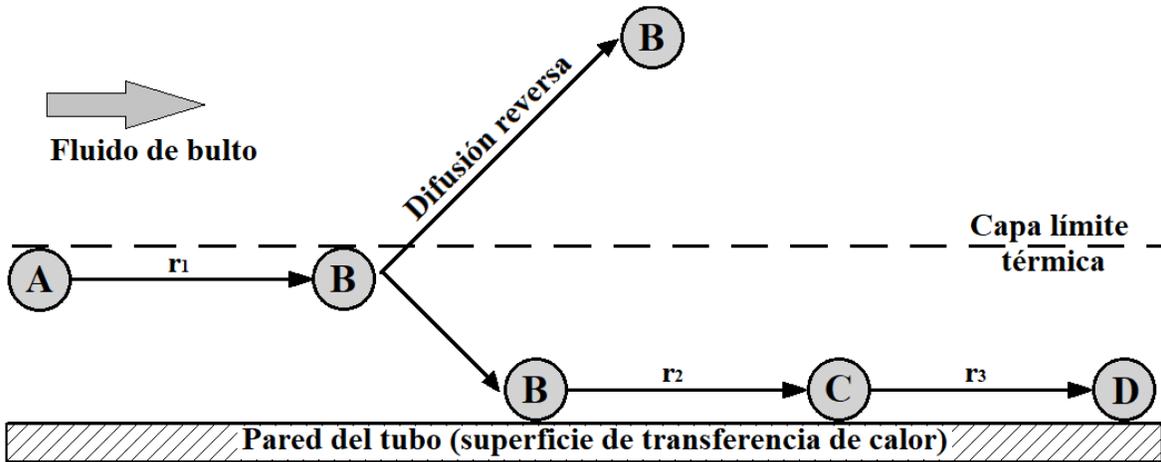
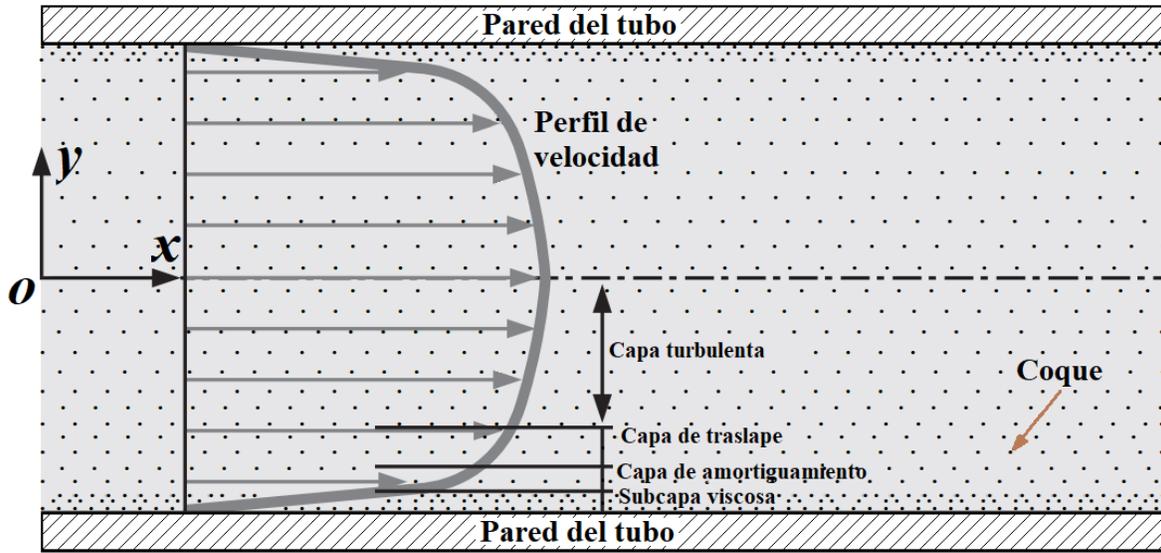


Fig. 3. 2. Mecanismo de reacción generalizado para el ensuciamiento [37].

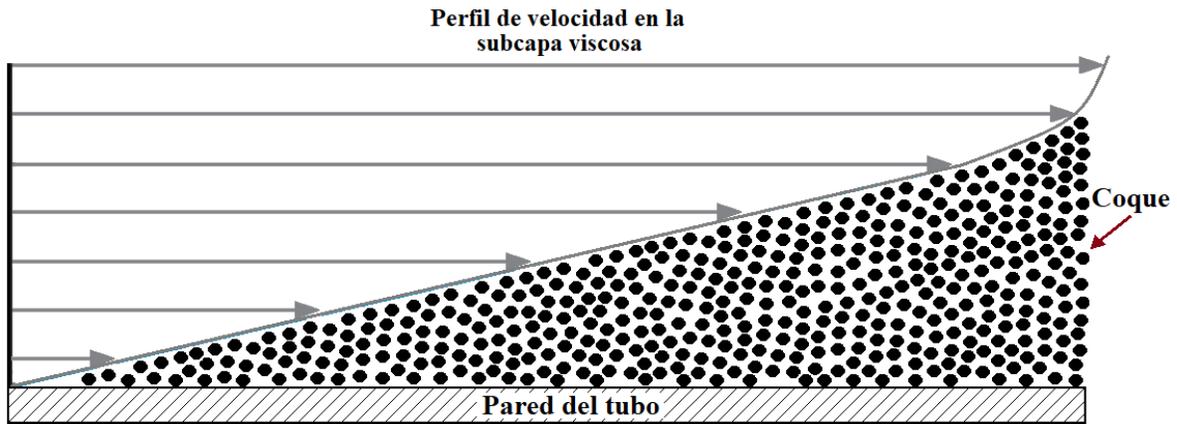
Cabe suponer que la velocidad de coquización (velocidad ensuciamiento) es proporcional a la concentración de coque, C_{coque} , y el coque se produce por la reacción química de la desintegración térmica del petróleo que se lleva a cabo en el dominio del fluido, ver Fig. 3.3a, se observa una sección representativa del flujo turbulento y el coque en el tubo, también se observan las diferentes secciones de las capas límite turbulentas que forman el perfil de velocidad (subcapa viscosa, capa de amortiguamiento, capa de traslape y capa turbulenta).

$$X_{cr} = \gamma C_{coque} \quad (3.31)$$

El coque se deposita y se acumula en la superficie interna del tubo para desarrollar una capa de ensuciamiento. El coque se encuentra dentro de la subcapa viscosa de la capa límite hidrodinámica debido a las velocidades más bajas, y esto facilita los mecanismos de depósito y acumulación de la capa de ensuciamiento. El espesor de la subcapa viscosa se puede estimar utilizando el perfil de velocidad universal reconociendo que $y^+ = u^+ = 5$ en la interfaz de la subcapa viscosa y la capa de amortiguamiento [7]. Además, se supone que las partículas de coque que forman la capa de ensuciamiento tienen un diámetro menor que el espesor de la subcapa viscosa, ver Fig. 3.3b.



(a)



(b)

Fig. 3. 3. Perfil de velocidad turbulento dentro del tubo y representación del coque (a). Perfil de velocidad de la subcapa viscosa con coque (b). Esquema de coque (no escalado).

Bajo este enfoque, la constante de proporcionalidad γ en la Ec. (3.31) debe estar vinculado a un mecanismo de transporte de masa, por lo tanto, un coeficiente de transferencia de masa global, K_C , podría ser un buen término para indicar un nivel de ensuciamiento de coque, de tal manera que la velocidad de coquización, X_{cr} , puede expresarse de la siguiente manera:

$$X_{cr} = \rho K_c Y_{coque} \quad (3.32)$$

El coeficiente de transferencia de masa global se puede obtener por la analogía de la convección Calor-Masa. Mediante el uso de las relaciones del número de Sherwood para un flujo completamente desarrollado en tubos circulares lisos y flujo turbulento [38] se define como sigue:

$$Sh = 0.023Re^{0.8}Sc^{0.4} \quad Re > 10000 \quad 0.7 < Sc < 160 \quad (3.33)$$

Entonces, el coeficiente de transferencia de masa global se obtiene de la definición del número de Sherwood, K_c :

$$K_c = \frac{ShD_i}{D} \quad (3.34)$$

Donde D es el diámetro del tubo y D_i es el coeficiente de la difusividad de masa para el flujo turbulento, el cual está relacionado con la viscosidad efectiva, μ_{ef} , y la densidad del petróleo, ρ :

$$D_i = \frac{\mu_{ef}}{\rho} \quad (3.35)$$

$$\mu_{ef} = \mu + \mu_t \quad (3.36)$$

El coque en la subcapa viscosa se deposita y acumula en la superficie interna del tubo como capa de ensuciamiento y se supone que se adhiere fuertemente, de tal manera que la cantidad de ensuciante no se puede remover por difusión o esfuerzos de corte. El incremento de la capa de ensuciamiento se muestra en la Fig. 3.4.

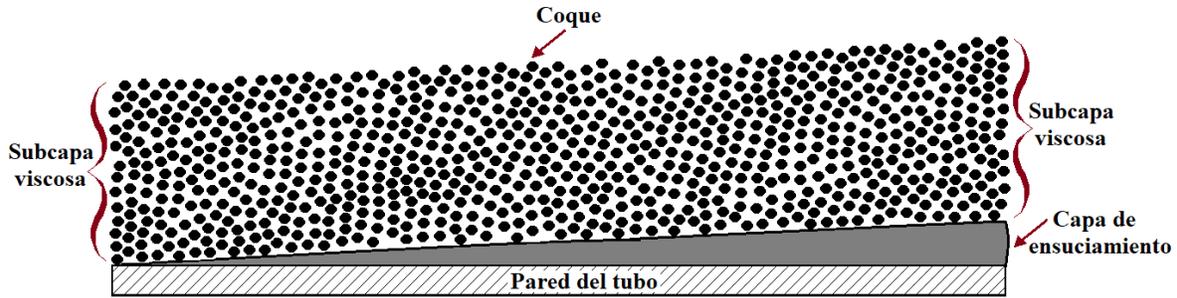


Fig. 3. 4. Capa de ensuciamiento que crece a lo largo del tubo (no a escala).

La capa de ensuciamiento se define como:

$$\Delta\varepsilon_{fl}(x) = \frac{X_{cr}(x)}{\rho_{fl}} \Delta t \quad (3.37)$$

Donde ρ_{fl} es la densidad de la capa de ensuciamiento.

3.10. CARACTERIZACIÓN DEL PETRÓLEO

3.10.1. Temperatura Media Gravimétrica (*Weight Average Boiling Point, WABP*) y Temperatura Media Volumétrica (*Volume Average Boiling Point, VABP*)

Para obtener las propiedades del petróleo involucradas en los fenómenos de transporte, tales como la viscosidad y la densidad, se requiere obtener un factor de caracterización. Bajo este esquema es necesario determinar las temperaturas de ebullición de productos del petróleo, las cuales son representadas por las curvas de destilación TBP (*True Boiling Point*). Por lo tanto, a partir de las curvas TBP para alimentaciones con diferente gravedad API [39] (Fig. 3.5) se realiza una regresión de superficie de respuesta para TBP en función del rendimiento (*Yield*) y la gravedad API, es decir $TBP = f(Yield, API)$, representada por la Ec. (3.38) y la gráfica de superficie (Fig. 3.6).

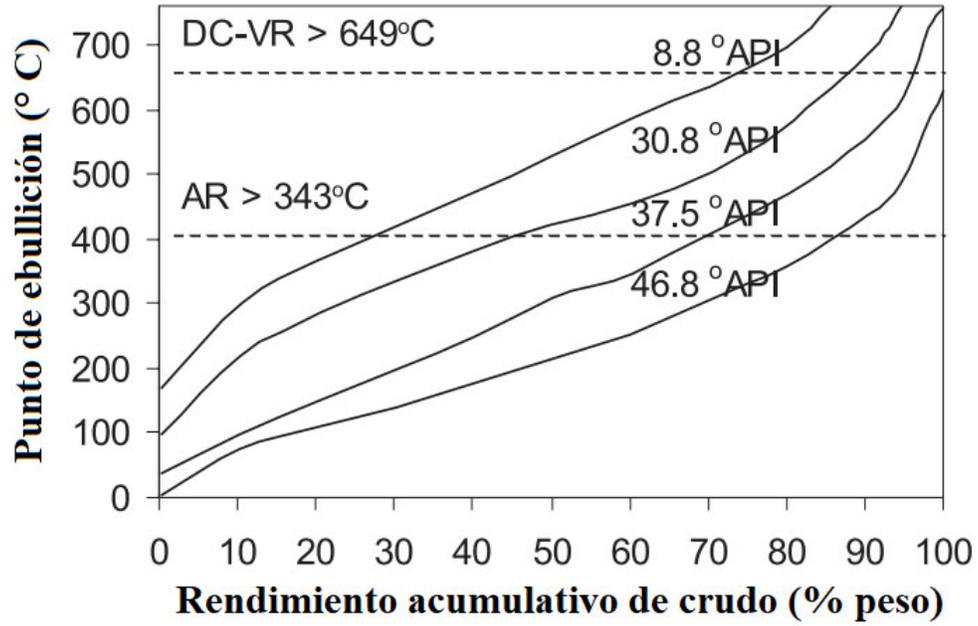


Fig. 3. 5. Curvas TBP para alimentaciones con diferente gravedad API [39].

$$TBP = 282.829 + 4.1844Yield + 1.67API + 0.0168Yield^2 - 0.153API^2 - 0.0304YieldAPI \quad (3.38)$$

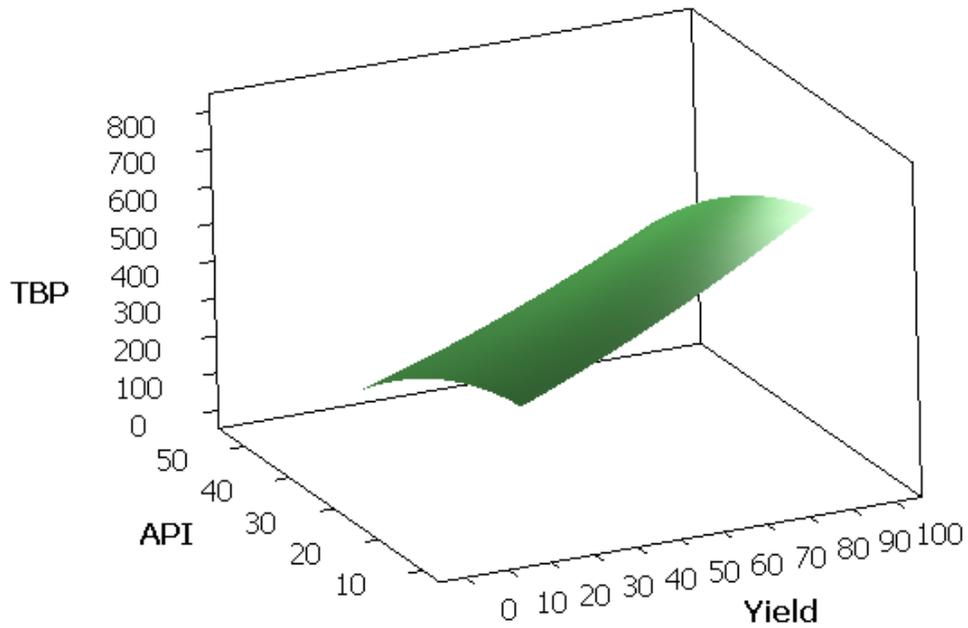


Fig. 3. 6. Gráfica de superficie para TBP.

En este trabajo bastara con determinar de la curva de destilación dos temperaturas promedio de ebullición: WABP y VABP, donde cada una de estas temperaturas se utilizan para determinar propiedades del petróleo o sus productos. Estas se describen a continuación.

La Temperatura Media Gravimétrica (*Weight Average Boiling Point*, WABP) representa la media aritmética de las temperaturas que corresponden al 10%, 30%, 50%, 70%, 90% peso destilado en la curva de destilación trazada por cualquiera de los métodos ASTM [40]. Se calcula con la siguiente ecuación:

$$WABP = \frac{TBP_{10} + TBP_{30} + TBP_{50} + TBP_{70} + TBP_{90}}{5} \quad (3.39)$$

Para determinar Temperatura Media Volumétrica (*Volume Average Boiling Point*, VABP), necesaria para obtener el factor de caracterización, se requiere caracterizar la curva de destilación mediante la pendiente de una línea recta entre los puntos 10 y 90% peso de destilado, la cual se define como *SL* en la Ec. (3.40). En conjunto con las correlaciones matemáticas en términos de la temperatura media gravimétrica (WABP) y la pendiente ASTM (*SL*), Ec. (3.41) y Ec. (3.42).

$$SL = \frac{TBP_{90} - TBP_{10}}{80} \quad (3.40)$$

$$VABP = WABP + \Delta T \quad (3.41)$$

$$\Delta T = -e^{-3.64991 - 0.02706VABP^{0.6667} + 5.163875SL^{0.25}} \quad (3.42)$$

Donde ΔT es la correspondiente corrección de temperatura para la temperatura media volumétrica (VABP).

3.10.2. Factor de caracterización KUOP

Desde el surgimiento de la industria del petróleo fue necesario definir un parámetro de caracterización basado en parámetros medibles con el propósito de clasificar al petróleo y

sus derivados. En este sentido en la Ec. (3.43) se establece un factor de caracterización denominado K_{UOP} para determinar la naturaleza química de los hidrocarburos [40]. El factor depende de la densidad (relación H/C) y el punto de ebullición (no. átomos de carbono).

$$K_{UOP} = \frac{1.2166(VABP + 273.15)^{1/3}}{sg} \quad (3.43)$$

Donde sg es la gravedad específica a 15.56 °C/15.56 °C ó 60 °F/60 °F.

Con éste factor es posible determinar propiedades termofísicas como la viscosidad dinámica y la densidad. Dichas propiedades son utilizadas para resolver los fenómenos de transporte involucrados en el modelo propuesto para predecir la formación y acumulación de coque en la tubería de los hornos o calentadores a fuego directo.

CAPÍTULO IV

SIMULACIÓN

4.1. GEOMETRÍA Y CONDICIONES DE FRONTERA

El proceso de coquización retardada (*Delayed coking*) se eligió para observar el fenómeno de ensuciamiento en la tubería de un calentador a fuego directo. De acuerdo a Martin y Barletta [14], cuando las temperaturas de metal del tubo TMT alcanzan 677° C (950 K), los calentadores deben de apagarse para proceder a la limpieza de los tubos (decoquizado). Esta temperatura corresponde al límite metalúrgico soportado por el acero inoxidable TP304L SS (18Cr-8Ni) [41], considerado en este trabajo.

Las simulaciones numéricas incluyen las siguientes suposiciones:

- Se utiliza un estado transitorio debido a que la acumulación de coque sólido es lenta en comparación con el coque que se obtiene de la velocidad de las reacciones químicas, por lo que se estableció un adecuado paso de tiempo de 21,600 s (6 h) en las simulaciones numéricas.
- El dominio computacional del tubo es en 2D y sus dimensiones son 25 m de largo (L) y 0.1524 m de diámetro (D).
- Se llevó a cabo un análisis de sensibilidad de malla para establecer el efecto del tamaño de malla en los resultados calculados y determinar el tamaño de malla óptimo para usar en la simulación. Se probaron mallas estructuradas de 210,000, 261,000, 384,000,

420,000 y 480,000 elementos cuadriláteros. Se observó que los resultados ya no variaban para la malla de 420,000 elementos. Esta malla se eligió para discretizar el dominio del tubo, refinada cerca de la pared del tubo para consolidar el cálculo en la región de la subcapa viscosa de la capa límite, ya que se supone que la formación de la capa de ensuciamiento se desarrolla en pared interior del tubo. El mallado se realizó en Ansys-Meshing® (Fig. 4.1).

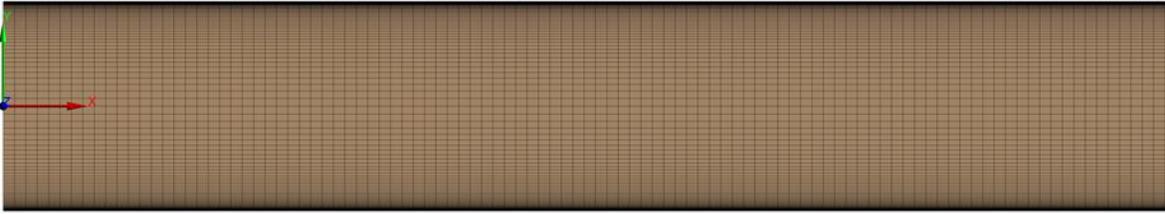


Fig. 4. 1. Malla del tubo usada para las simulaciones numéricas.

- Se estableció la condición de frontera a la entrada de la tubería "*velocity inlet*", con un perfil de velocidad para la condición de flujo completamente desarrollado, el cual fue ingresado mediante una UDF (Función Definida por el Usuario), con valor promedio de 2 m/s. También, la temperatura del petróleo a la entrada es de 673 K (400 °C) y las fracciones de masa de los pseudo-componentes de que se constituye el residuo de vacío (RV) del petróleo Arabian light, propuesto para este trabajo, se muestran en la Tabla 4.1. Este residuo tiene una densidad en grados API (15.56 °C/15.56 °C) de 7.1.

Tabla 4. 1. Fracción masa de los pseudo-componentes a la entrada del tubo.

Pseudo-componente	Y_i
Destilado	0.00
Resinas	0.32
Saturados	0.18
Aromáticos	0.34
Asfaltenos	0.16
Mesoasfaltenos	0.00
Coque	0.00

- A la salida del tubo se estableció la condición de frontera "*pressure outlet*", con un valor de 0 Pa de presión manométrica.

- La pared del tubo se modeló utilizando condición de frontera de no deslizamiento, con flux de calor constante en la pared del tubo de $88,329 \text{ W/m}^2$. Es un flujo de calor pico máximo en un calentador a fuego directo, este valor es recomendado para evaluar el potencial de coquización de acuerdo a Martin y Barletta [14].
- Las propiedades físicas del fluido como densidad [42], viscosidad [42,43], calor específico [44] y la conductividad térmica [45], son consideradas como función de la temperatura en grados Kelvin, Ecs. (4.1-4.4)(ver Fig. 4.2-4.5), respectivamente. Se introducen como polinomios o como una función potencial en el caso de la viscosidad a través de una UDF. De forma similar se hizo uso de estas UDFs para introducir el término fuente para cada uno de los pseudo-componentes y resolver la ecuación de transporte de especies (ver Anexo A.1). En la Ec. (4.2) A y B son constantes del fluido, que en este caso para el residuo de vacío (RV) del petróleo Arabian light, valen 37.2564 y 14.2007 , respectivamente. Dichos valores fueron obtenidos a partir de un método iterativo, utilizando la relación del factor de caracterización K_{VOP} para la viscosidad en dos puntos extremos de temperatura.

$$\rho = 1.7768 \cdot 10^{-6} \cdot T^2 - 5.3905 \cdot 10^{-1} \cdot T + 1173.7 \quad (4.1)$$

$$\mu = \left[10^{10(A-B \cdot \log(T))} - 0.7 \right] \cdot 10^{-6} \cdot \rho \quad (4.2)$$

$$c_p = 1.4191 \cdot 10^{-5} \cdot T^2 + 3.0126 \cdot T + 785.8 \quad (4.3)$$

$$k = -1.9482 \cdot 10^{-9} \cdot T^2 - 5.6777 \cdot 10^{-5} \cdot T + 0.1298 \quad (4.4)$$

El intervalo de temperaturas en las que estas funciones son válidas es de 400 K a 810.928 K ($126.85 \text{ }^\circ\text{C}$ a $537.778 \text{ }^\circ\text{C}$). Para la capa de ensuciamiento acumulada en la pared interna del tubo, se considera que sus propiedades físicas permanecen constantes con la temperatura o varían de forma insignificante, con un valor de densidad, ρ_{fl} , de 1600 kg/m^3 [12], el calor específico, $c_{p,fl}$, de 1500 J/kg-K [19], y una conductividad térmica, k_{fl} , de 6.46 W/m-K [12].

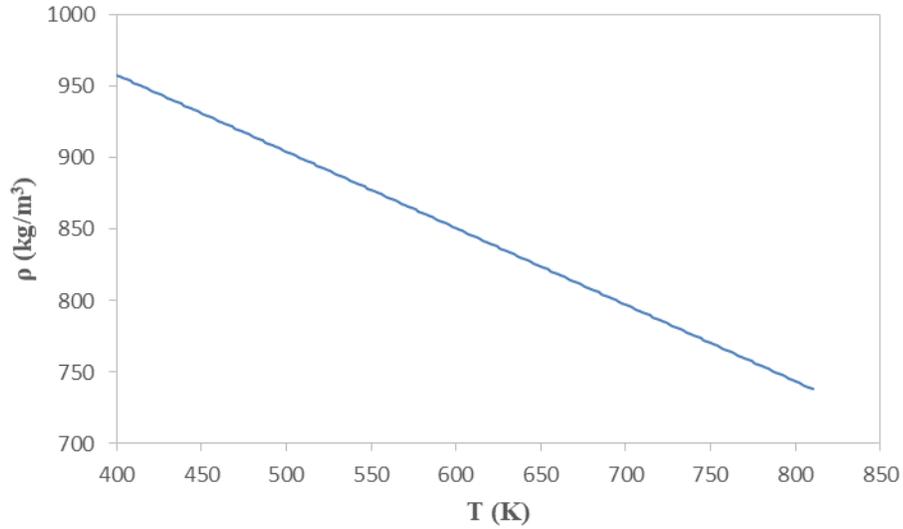


Fig. 4. 2. Variación de la densidad del residuo de vacío (RV) del petróleo Arabian light con la temperatura.

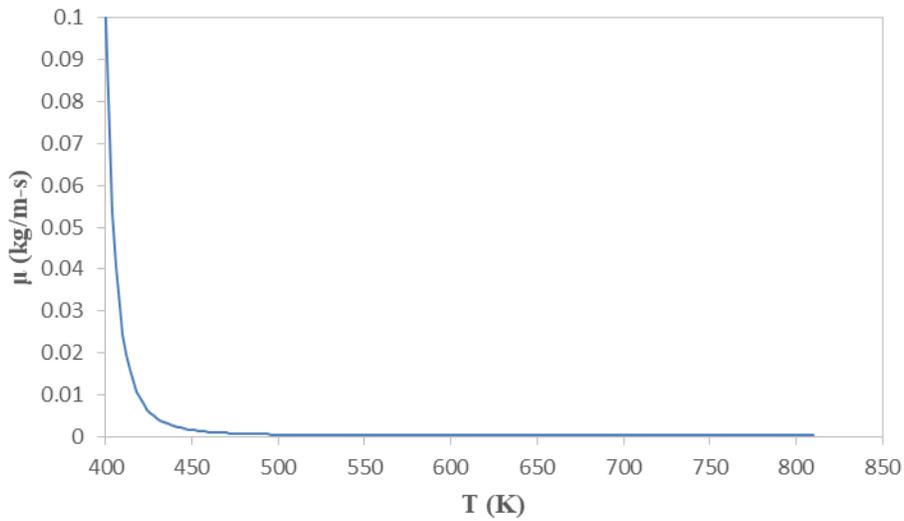


Fig. 4. 3. Variación de la viscosidad del residuo de vacío (RV) del petróleo Arabian light con la temperatura.

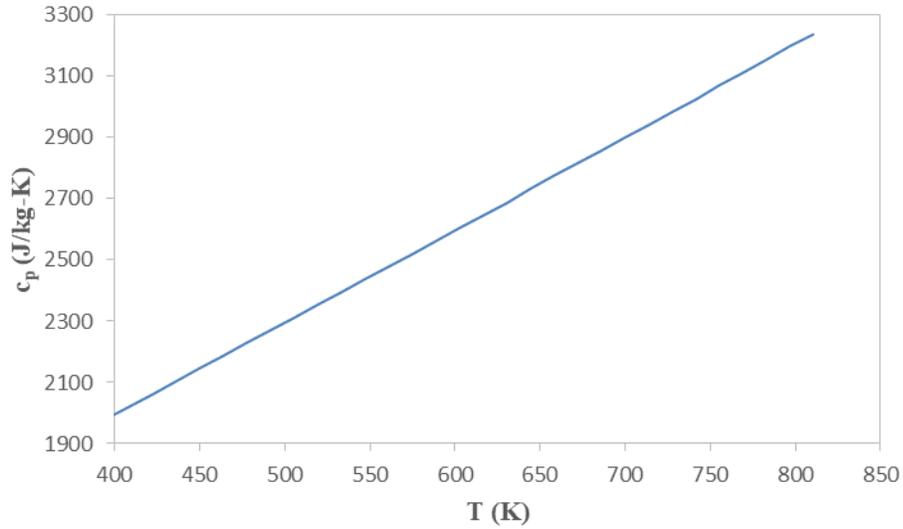


Fig. 4. 4. Variación del calor específico del residuo de vacío (RV) del petróleo Arabian light con la temperatura.

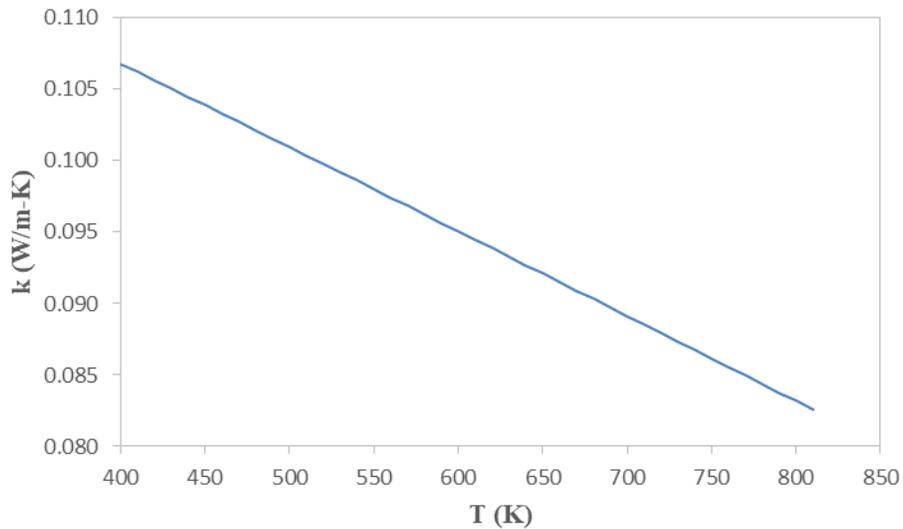


Fig. 4. 5. Variación de la conductividad térmica del residuo de vacío (RV) del petróleo Arabian light con la temperatura.

4.2. MALLA DINÁMICA

El Método de Malla Dinámica de Ansys-Fluent® [46] presenta tres grupos de métodos de movimiento de malla para actualizar la malla en las regiones de deformación sujetas al

movimiento definido en las fronteras. Estos métodos son: *Smoothing*, *Layering* y *Remeshing*.

Cuando se usa el *Smoothing* (Suavizado) para ajustar la malla de una zona con una frontera móvil y/o deformante, los nodos interiores de la malla se mueven, pero el número de nodos y su conectividad no cambian. De esta forma, los nodos interiores “absorben” el movimiento de la frontera.

El *Layering* (Capas) en zonas de malla con celdas cuadriláteras/hexaédricas, puede usar capas dinámicas para agregar o eliminar capas de celdas adyacentes a una frontera en movimiento, según la altura de la capa adyacente a la superficie en movimiento. Es decir, este esquema de malla dinámica implica la creación y destrucción de celdas, por lo tanto, se usa para un movimiento puramente lineal. Otra limitante de este método implica que no se puede usar con las denominadas paredes de dos lados (*Wall* y *Wall-Shadow*), en nuestro caso, la interfaz del dominio sólido (capa de ensuciamiento) y el dominio fluido (petróleo), como se puede observar en la Fig. 4.6b.

El método *Remeshing* (Remallado) consiste principalmente en remallar celdas triangulares o tetraédricas. En nuestro caso, dada la estabilidad que brinda a los cálculos de los fenómenos de transporte, se usó malla estructurada con celdas cuadriláteras para los dominios sólido y fluido.

Dadas las consideraciones anteriores, se usó únicamente el Método *Smoothing* (Suavizado) para la Malla Dinámica, el cual se acopla con el Modelo de ensuciamiento por coque (Sección 3.9). Este método permite el crecimiento de la malla y se controla con funciones definidas por el usuario (UDFs), el crecimiento de la malla es de acuerdo con el crecimiento de la capa de ensuciamiento desarrollada en la superficie interna del tubo. La Fig. 4.6 muestra la malla inicial y la malla final debido al crecimiento de la capa de ensuciamiento. El tubo está limpio al principio del proceso (Fig. 4.6a), por lo tanto, no hay una malla que represente la capa de ensuciamiento. Posteriormente, el tubo se ensucia con coque sólido al final del proceso (Fig. 4.6b), debido a que el coque se añade en la superficie

interna como una capa de ensuciamiento hasta que alcanza el espesor máximo permitido para dicha capa. La malla crece en la superficie interna del tubo como un dominio sólido mientras que el dominio fluido disminuye, la malla del dominio fluido absorbe este movimiento del dominio sólido distribuyendo las celdas del dominio fluido, de modo que la solución y la convergencia se logra con la malla dinámica.

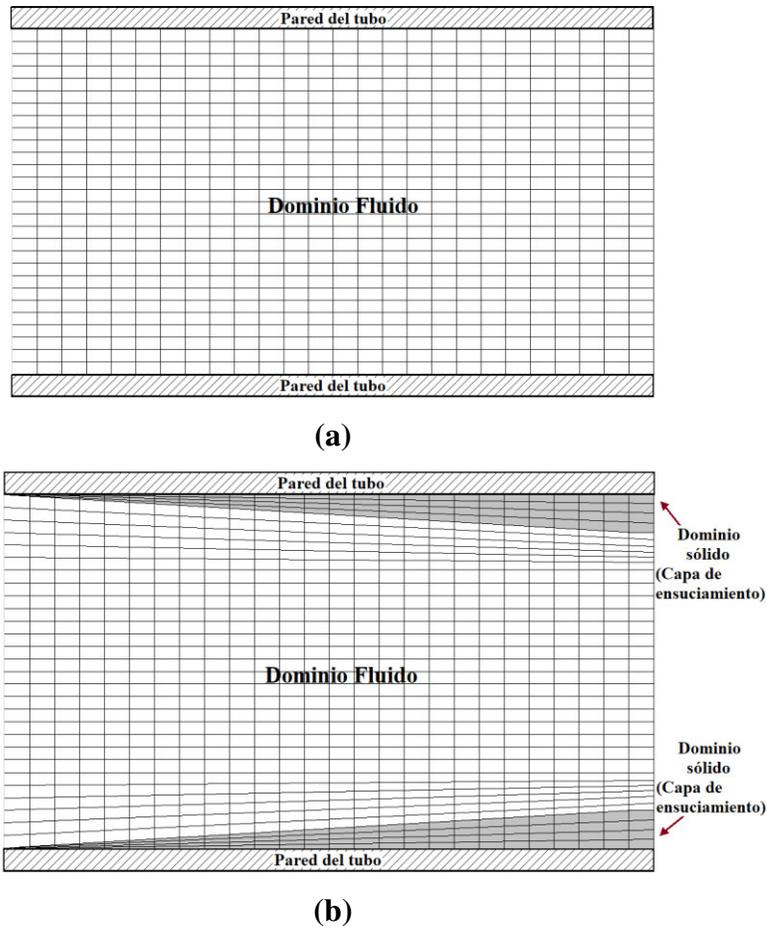


Fig. 4. 6. Malla dinámica al principio (a) y al final del proceso (b).

4.3. ESTRATEGIA DE SOLUCIÓN

Para la solución del Modelo cinético químico de la desintegración térmica del petróleo (Sección 3.3), la Ecuación de continuidad (Sección 3.4), el Modelo de transporte de especies (Sección 3.5), la Ecuación de momento (Sección 3.6), el Modelo de turbulencia (Sección 3.7) y la Ecuación de energía (Sección 3.8); se usó el acoplamiento presión-velocidad, el cual se logra mediante el empleo del algoritmo SIMPLE. El criterio de

convergencia se basa en el valor residual de las ecuaciones a resolver y se considera que el sistema ha convergido cuando los residuales son menores a seis órdenes de magnitud para las variables de la ecuación de energía y momento. Para la ecuación de continuidad se considera cuatro órdenes de magnitud. En el caso de la fracción masa del pseudo-componente coque, se establece en cinco ordenes de magnitud, esto al ser el pseudo-componente involucrado en la formación de la capa de ensuciamiento, requiriéndose mayor precisión en la predicción de su concentración, de tal forma que dicha capa de prediga en ese mismo sentido. Para las restantes ecuaciones, se manejaron los valores usuales. Una vez que converge la solución, el Modelo de ensuciamiento por coque (Sección 3.9) se acopla con la Malla dinámica (Sección 4.2), programado por una UDF para controlar el crecimiento y estiramiento de las celdas de la malla del dominio sólido, y el decrecimiento y contracción de las celdas de la malla del dominio fluido. El diagrama de flujo de los cálculos se muestra en la Fig. 4.7.

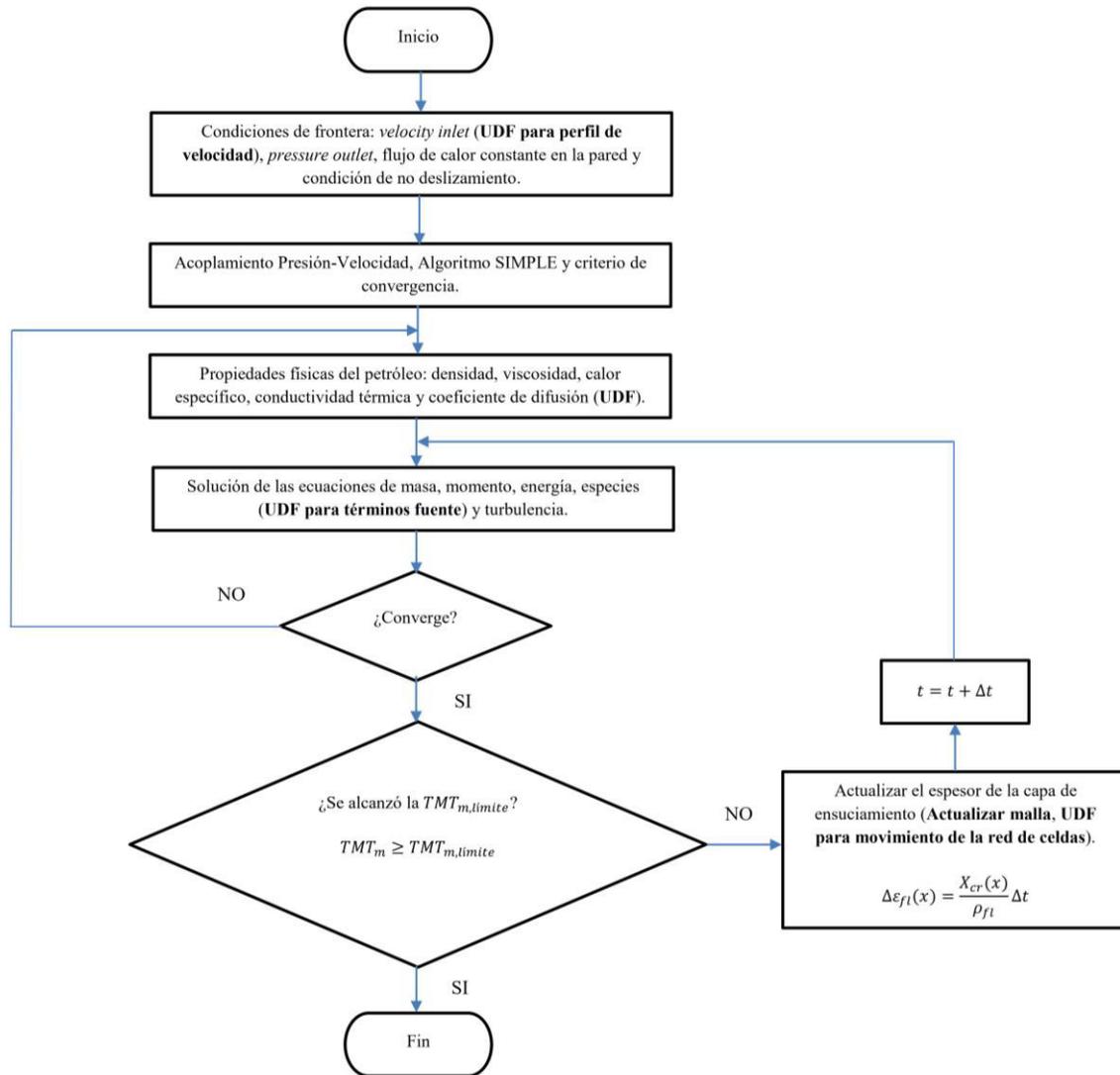


Fig. 4. 7. Algoritmo del proceso de desintegración térmica del petróleo y ensuciamiento por coque en la superficie interior del tubo.

CAPÍTULO V

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

5.1. VALIDACIÓN DEL MODELO

La validación del modelo numérico se realizó con los datos experimentales reportados en la literatura. Hay muchos experimentos de flujos monofásicos en tuberías reportados en la literatura; por ejemplo, los reportados por Laufer [47] para el flujo de aire turbulento dentro de un tubo. El perfil de velocidad fue modelado en Ansys-Fluent®, y comparando los resultados adimensionales estimados por el modelo CFD al inicio del proceso con los resultados experimentales, estuvo en una buena concordancia (Fig. 5.1), con un porcentaje de error máximo de 6.8%. Además, la caída de presión obtenida por CFD para diferentes Reynolds se comparó con la caída de presión obtenida por la ecuación empírica/analítica derivada del factor de fricción de Moody [30]; nuevamente, los resultados numéricos de CFD están muy cerca, con un porcentaje de error máximo de 1.2%, ver Fig.5.2.

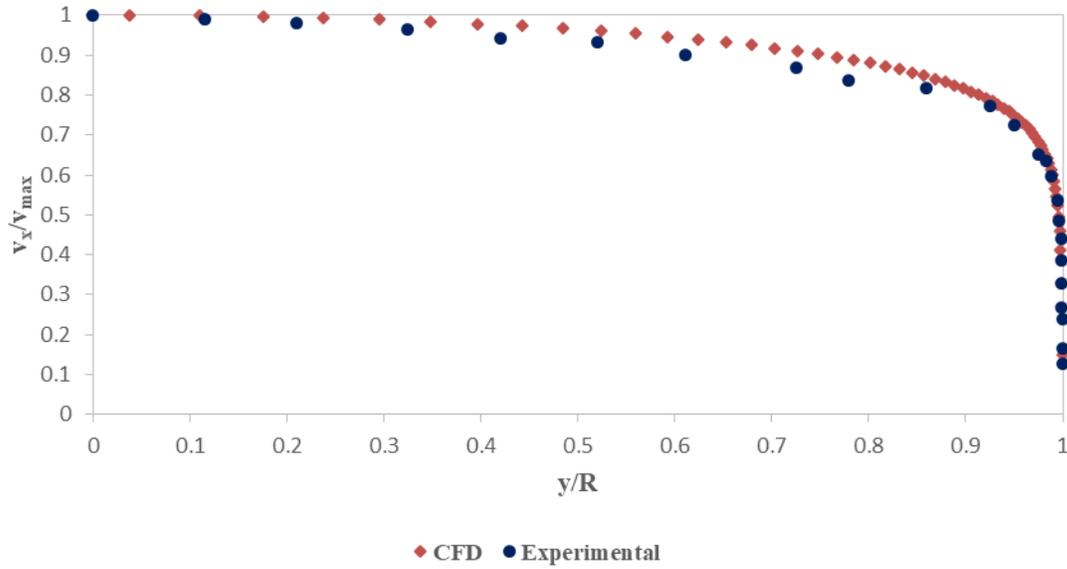


Fig. 5. 1. Comparación del perfil de velocidad estimado por CFD y los datos experimentales para flujo turbulento de Laufer [47] ($Re = 500,000$).

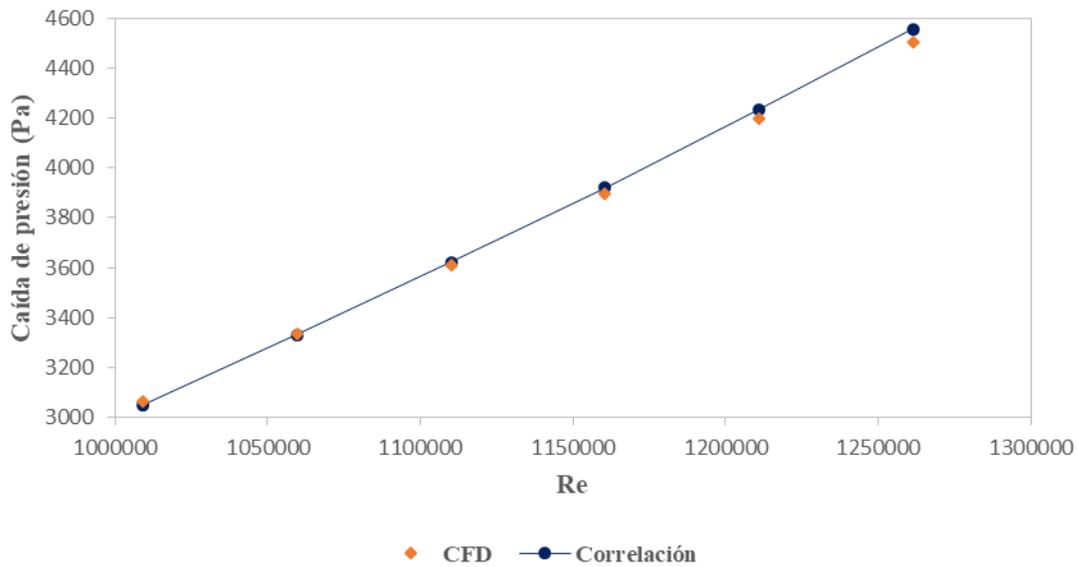


Fig. 5. 2. Comparación de la caída de presión estimada por CFD y por la correlación para flujo turbulento.

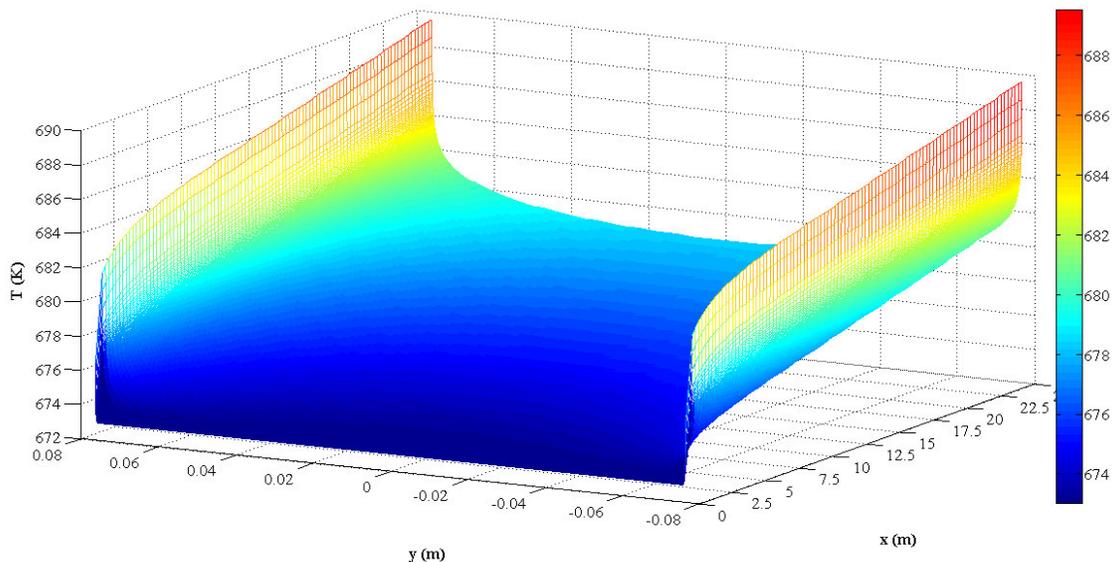
Dado que no hay experimentos específicos en la literatura sobre las condiciones operativas que en este caso se establecieron para el modelo, los resultados similares obtenidos con CFD para las comparaciones del perfil de velocidad adimensional y la caída de presión,

permiten determinar que el modelo es confiable. Por lo tanto, los cálculos de la temperatura, la velocidad y las fracciones masa para cada uno de los pseudo-componentes, serán muy aproximados a los que se obtienen en un proceso industrial, para la desintegración térmica de petróleo.

5.2. ANÁLISIS GENERAL

5.2.1. Campo de temperatura, fracción masa de coque y fracción masa de destilado

El perfil y los contornos de la temperatura del petróleo a lo largo del tubo se ilustran en la Fig. 5.3, muestra que la transferencia de calor al centro del tubo ocurre de modo que la zona de entrada térmica se alcanza a una longitud de 2 m. Dado que la transferencia de calor tiene lugar desde la pared del tubo al fluido, se alcanza una temperatura máxima de 689.5 K (416.5 °C) a la salida del tubo cerca de la pared. La temperatura promedio del petróleo aumenta desde la entrada de 673 K (400 °C) hasta la salida del tubo a 679.3 K (406.3 °C), esto se debe al efecto de la capa límite térmica (una influencia en la velocidad de transferencia de calor al centro del tubo). La malla cerca de la pared fue refinada para considerar este fenómeno.



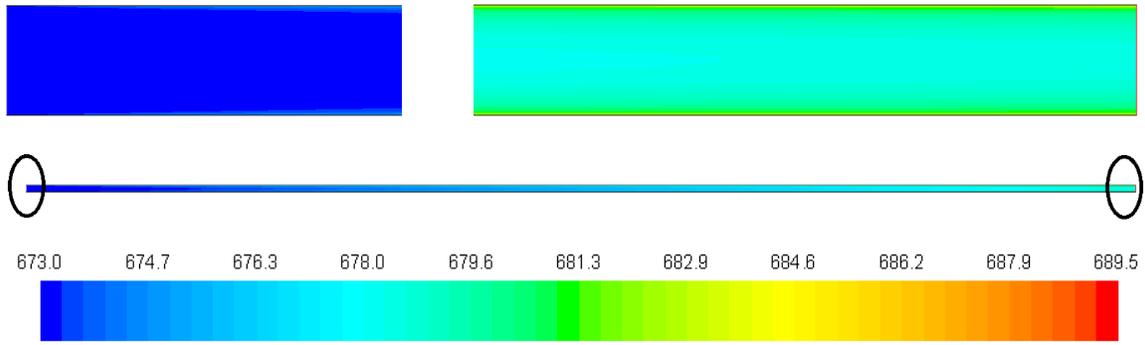
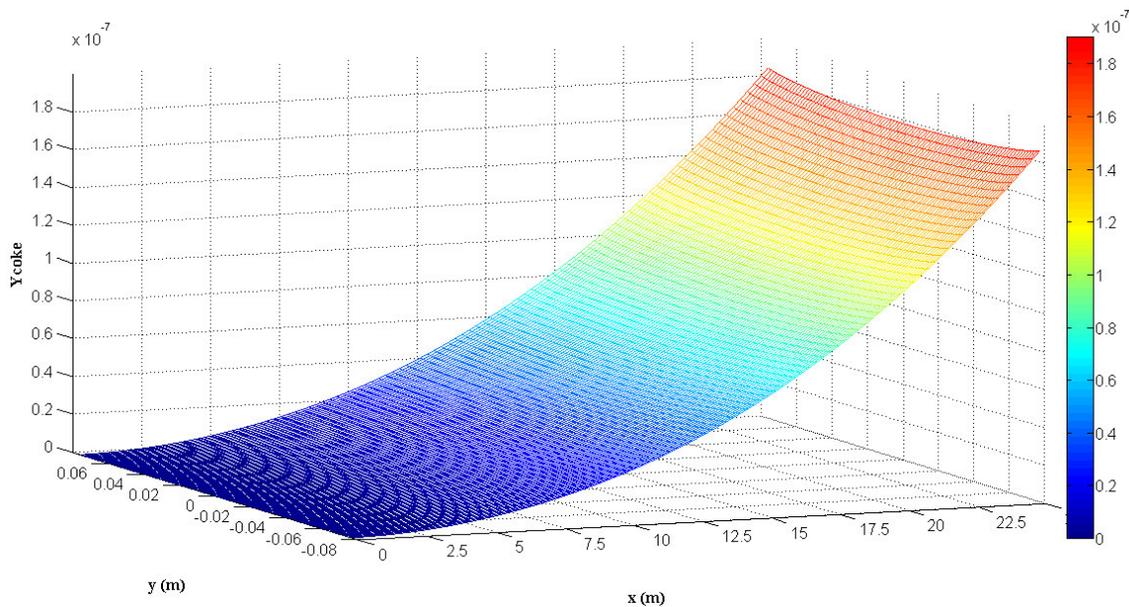


Fig. 5. 3. Perfil y contornos de la temperatura del petróleo.

La Fig. 5.4 muestra el perfil y los contornos de la fracción masa del coque, se puede observar que existe una gran dependencia de la formación de coque y la temperatura del petróleo. El aumento del coque se obtiene por la cinética química. La temperatura del petróleo cerca de la superficie interna del tubo y la formación del coque es mayor en comparación con la zona central del tubo, debido a las constantes de la velocidad de reacción que están relacionadas con la temperatura y aumentan exponencialmente (con la temperatura). Se puede observar una variación radial de la fracción masa de coque, esto se debe a que la transferencia de calor en flujo turbulento es más efectiva y tiene una mayor influencia en las velocidades de reacción y por lo tanto, en la concentración del coque.



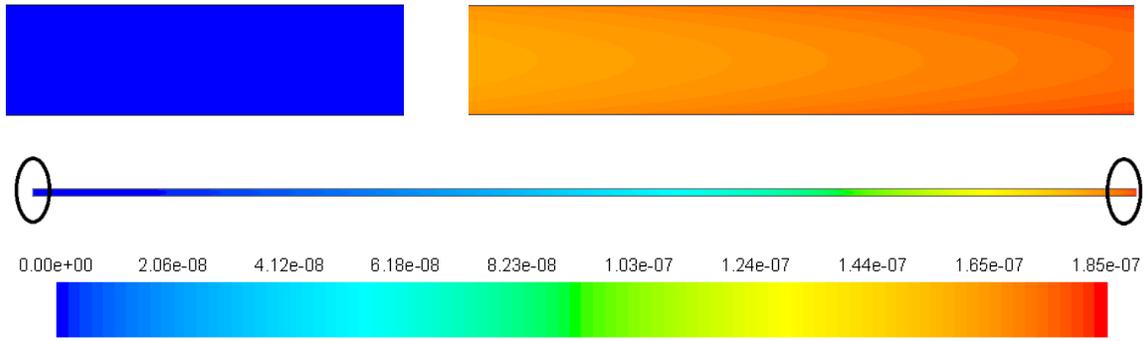
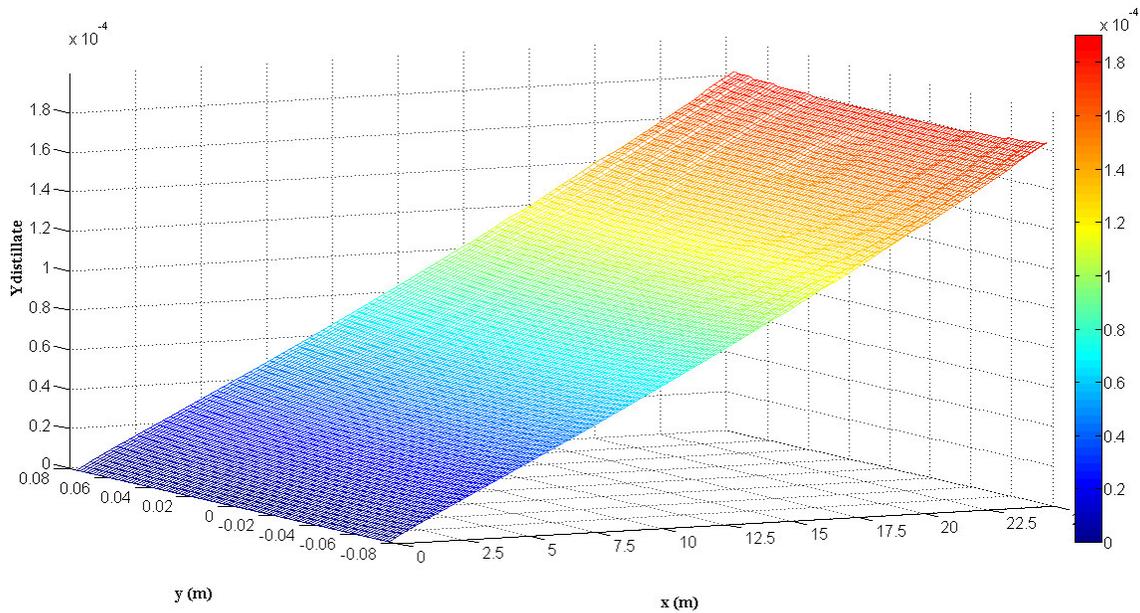


Fig. 5. 4. Perfil y contornos de la fracción masa del coque.

La Fig. 5.5 muestra el perfil y los contornos del destilado. Se observa que la fracción masa del destilado aumenta desde la entrada hasta la salida del tubo debido al incremento de la temperatura a lo largo del tubo, ver Fig. 5.3. Según la Fig. 5.4 y la Fig. 5.5, aproximadamente se produce 990 veces más destilado que coque, lo que demuestra adecuadamente la viabilidad de los procesos, por lo tanto, la formación de destilado es más rápida en comparación con la formación de coque, ya que el destilado depende directamente de la cantidad de compuestos aromáticos y saturados. Se esperaba este fenómeno, y se debe a la fracción masa de los pseudo-componentes que se introdujo en la entrada del tubo para caracterizar el residuo de vacío (RV) del petróleo Arabian light y a la cinética de desintegración térmica.



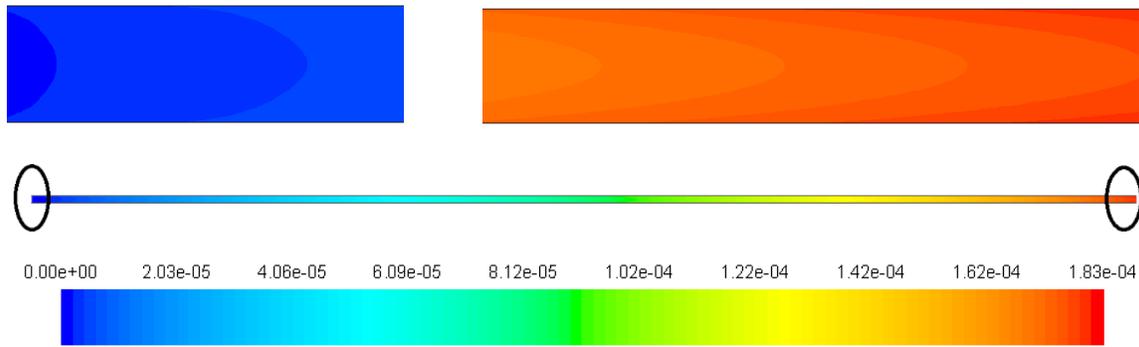


Fig. 5. 5. Perfil y contornos de la fracción masa del destilado.

5.2.2. Perfil del espesor local de la capa de ensuciamiento en el tiempo de operación

El crecimiento de la capa de ensuciamiento en la superficie interna del tubo se muestra en la Fig. 5.6, se puede observar durante el tiempo de 8 y 16.8 meses. El comportamiento del incremento de la capa de ensuciamiento es exponencial, y se debe a que depende de la concentración del coque dentro de la subcapa viscosa. La capa de ensuciamiento aumenta aproximadamente a una velocidad constante en cada punto local de la dirección x . El grosor máximo de la capa de ensuciamiento es de 0.018 m (18 mm), es un grosor considerable, este grosor máximo se alcanza en el tiempo de 16.8 meses cuando se obtiene la temperatura de metal del tubo máxima límite (a la salida del tubo). El diámetro del tubo se reduce de 0.1524 m (152.4 mm) en la entrada del tubo a 0.1164 m (116.4 mm) en la salida del tubo, aproximadamente una reducción del 24%. Este comportamiento hace que el flujo de fluido del petróleo aumente su velocidad debido a la reducción de la sección transversal.

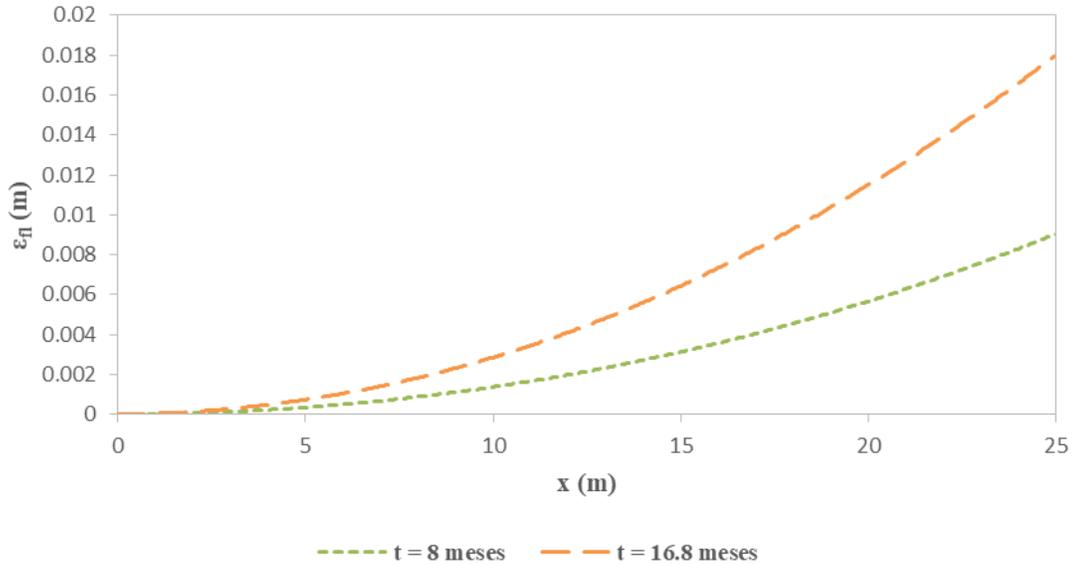


Fig. 5. 6. Crecimiento de la capa de ensuciamiento.

5.2.3. Perfiles de velocidad de flujo de masa de petróleo

La velocidad de flujo de masa de petróleo permanece constante al inicio del proceso, porque la capa de ensuciamiento no existe y la sección transversal es constante en el tubo. Para los siguientes tiempos operativos, la velocidad de flujo de masa de petróleo permanece constante desde la entrada del tubo hasta una longitud de aproximadamente 5 m, debido a que el espesor de la capa de ensuciamiento ha alcanzado un valor máximo de 0.001 m (1 mm), esto tiene un impacto insignificante en el aumento de la velocidad del petróleo y, por lo tanto, en la velocidad de flujo de masa de petróleo. Por encima de una longitud de 5 m del tubo, la velocidad de flujo de masa de petróleo aumenta exponencialmente debido al incremento del espesor de la capa de ensuciamiento (reducción de la sección transversal). En el tiempo de 16.8 meses, se alcanzó el valor máximo de 2190 kg/m²-s de la velocidad de flujo de masa de petróleo a la salida del tubo, ver Fig. 5.7.

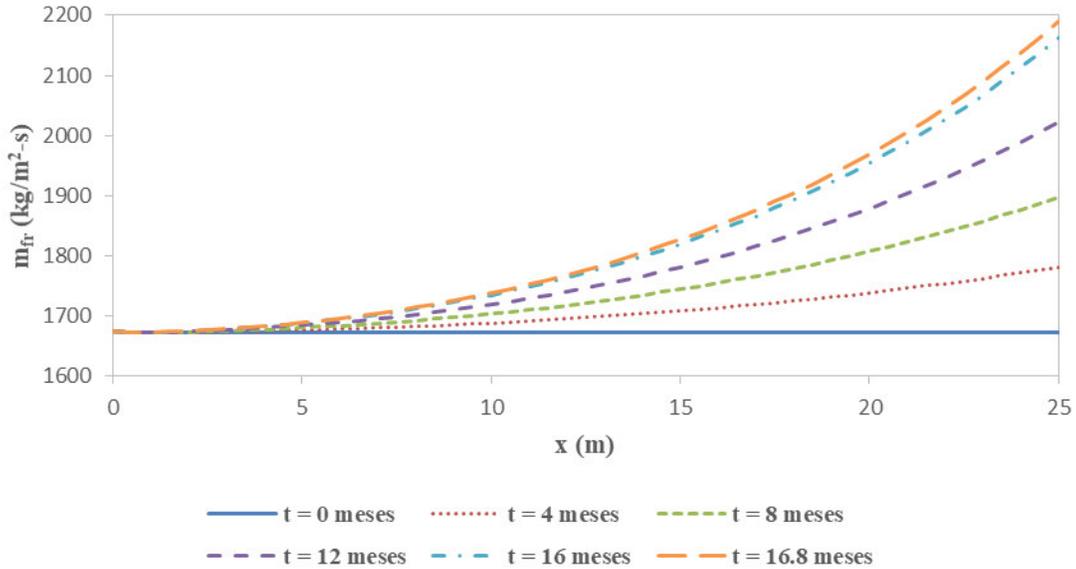


Fig. 5. 7. Perfiles de velocidad de flujo de masa de petróleo.

5.2.4. Perfiles de temperatura de película del petróleo y razón de resistencias térmicas

La temperatura de película del petróleo (temperatura en la interfaz petróleo-capa de ensuciamiento) a lo largo del tubo para diferentes tiempos operativos se muestra en la Fig. 5.8. Se puede observar que de 0 m a 5 m de la longitud del tubo, la temperatura de película aumenta de manera similar para todo el tiempo operativo. Además, se observa que aparecen fluctuaciones a lo largo del tiempo operativo, estas fluctuaciones de la temperatura de película dependen de la interacción entre la resistencia térmica por convección y la resistencia térmica por conducción (razón de resistencias térmicas) debido a la reducción de la sección transversal y el incremento de la capa de ensuciamiento. La razón de resistencias térmicas disminuye a lo largo del tubo y con el tiempo operativo, como se muestra en la Fig. 5.9. Para un tiempo operativo superior a 12 meses, la temperatura de película disminuye cerca de la salida del tubo debido a que la velocidad de flujo de masa de petróleo alcanza un valor de aproximadamente $2000 \text{ kg/m}^2\text{-s}$. La temperatura de película del petróleo disminuye hasta que la resistencia térmica por convección y conducción son iguales, este comportamiento permite aumentar el tiempo de operación de un calentador a fuego directo. Esto se debe a que aumenta la velocidad del petróleo (disminuyendo el

tiempo de residencia) y se mejora el coeficiente convectivo de transferencia de calor, en consecuencia, la temperatura de película disminuye.

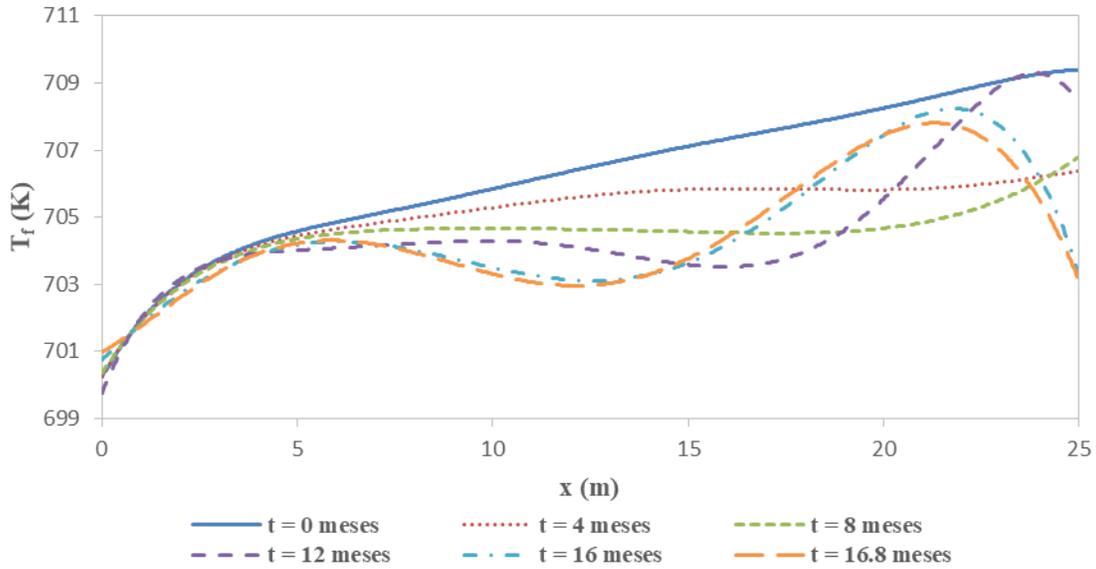


Fig. 5. 8. Perfiles de temperatura en la interfaz petróleo-capa de ensuciamiento (temperatura de película del petróleo).

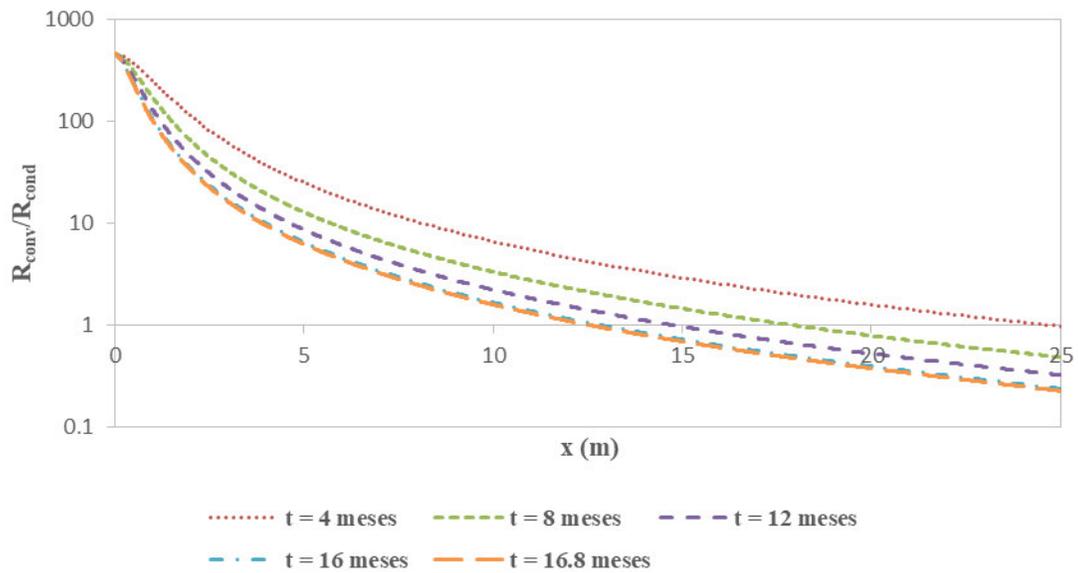


Fig. 5. 9. Perfiles de la razón de resistencias térmicas.

5.2.5. Perfiles del coeficiente convectivo de transferencia de calor del flujo

La Fig. 5.10 muestra el comportamiento del coeficiente convectivo transferencia de calor a lo largo del tubo para diferentes tiempos operativos. La reducción de la sección transversal del tubo y el aumento de la velocidad del petróleo por el crecimiento de la capa de ensuciamiento, afecta directamente en el aumento del coeficiente convectivo de transferencia de calor. Se observa que el coeficiente convectivo de transferencia de calor aumenta a partir de una longitud del tubo de 5 m, luego, cuando una velocidad de flujo de masa de petróleo es aproximadamente $2000 \text{ kg/m}^2\text{-s}$, el coeficiente convectivo de transferencia de calor aumenta de manera más significativa (Fig. 5.7), por lo tanto, la temperatura de película disminuye (Fig. 5.8).

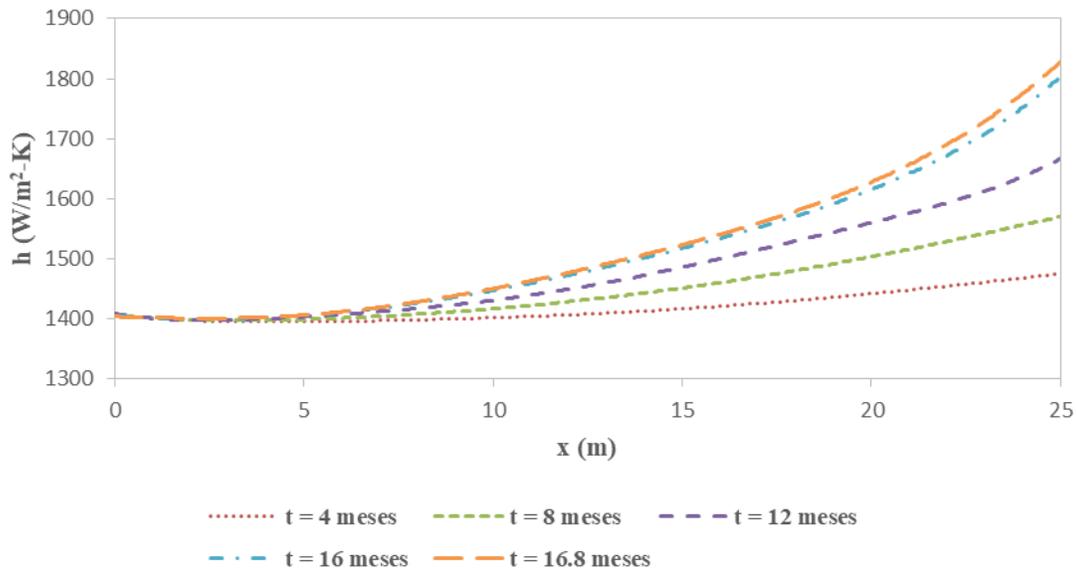


Fig. 5. 10. Perfiles del coeficiente convectivo de transferencia de calor del flujo.

5.2.6. Perfiles de la velocidad de coquización

Los perfiles de la velocidad de coquización se muestran en la Fig. 5.11. Se muestra que la velocidad de coquización es una función exponencial de la temperatura de película del petróleo y de la velocidad de reacción, tal como se esperaba. Además, la velocidad de coquización aumenta a lo largo del tubo debido a que aumenta la fracción masa del coque (ver Fig. 5.4) y disminuye a lo largo del tiempo operativo debido a que el coque decrece

por la disminución de la temperatura de película del petróleo promedio (706.3 K, 704.5 K y 703.5 K, para 0, 8 y 16.8 meses, respectivamente).

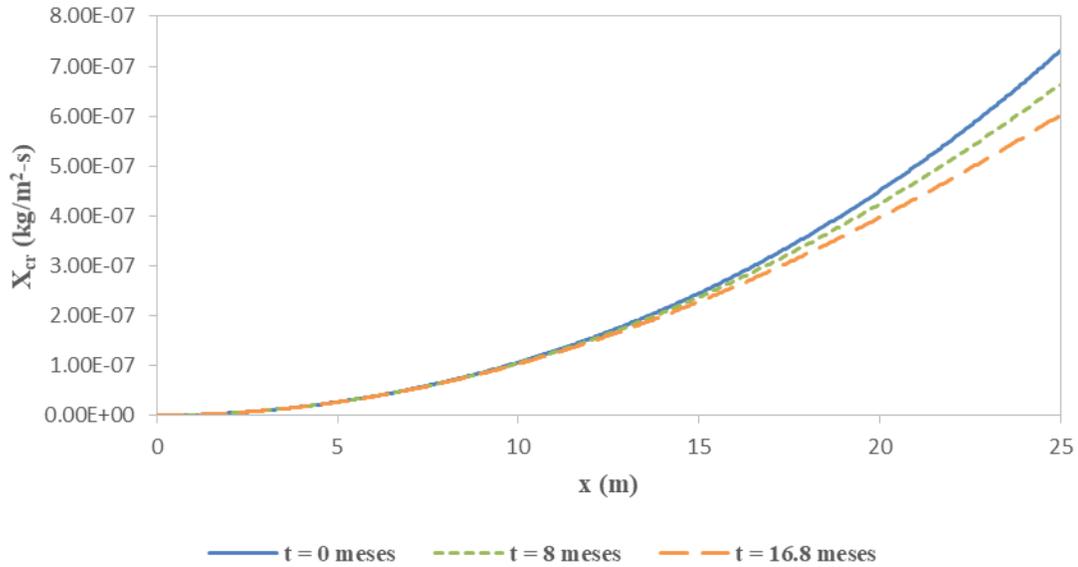


Fig. 5. 11. Perfiles de la velocidad de coquización.

5.2.7. Perfiles de la temperatura de metal del tubo (TMT)

La temperatura de metal del tubo (TMT) a lo largo de la dirección x del tubo y el tiempo de operación, se muestran en la Fig. 5.12. La TMT aumenta debido a que la capa de ensuciamiento que está creciendo en la superficie del tubo (ver Fig. 5.6) tiene un comportamiento como un material aislante. La TMT aumenta a lo largo del tubo y el tiempo operativo. El incremento de la TMT se debe a que la fracción masa de coque en la subcapa viscosa aumenta, así como la velocidad de coquización, y en consecuencia a la capa de ensuciamiento que crece. La temperatura del metal del tubo máxima es 709.7 K, 770.2 K, 829.5 K, 886.3 K, 939.8 K y 949.7 K para 0, 4, 8, 12, 16 y 16.8 meses, respectivamente, a la salida del tubo.

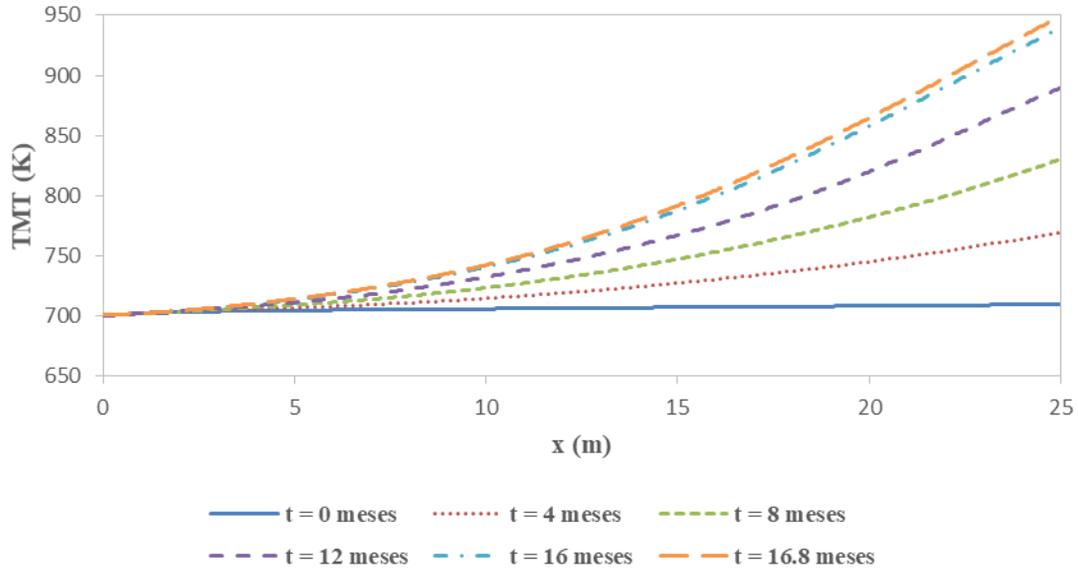


Fig. 5. 12. Perfiles de la temperatura de metal del tubo (TMT).

5.2.8. Temperatura de metal del tubo máxima contra el tiempo

La temperatura de metal del tubo máxima, TMT_m , representa un "punto caliente" que se alcanza a la salida del tubo (ver Fig. 5.13). El aumento de la temperatura es progresivo y aproximadamente lineal, este incremento es de alrededor de 14.4 K por mes, esto es esperado debido a que el fenómeno de depósito de coque es lento. Un tiempo de operación de 16.8 meses es suficiente para alcanzar la $TMT_{m, límite}$ de 950 K (677 °C), esta alta temperatura hace que el calentador a fuego directo sea apagado debido a que es necesario eliminar la capa coque sólido agregada en la superficie interna del tubo, de lo contrario el ciclo de vida del tubo se reduciría o puede ocurrir una falla mecánica del tubo. El tiempo para alcanzar esta condición, está dentro del intervalo de operación de un calentador a fuego directo típico para la coquización retardada (*delayed coking*) [14,48].

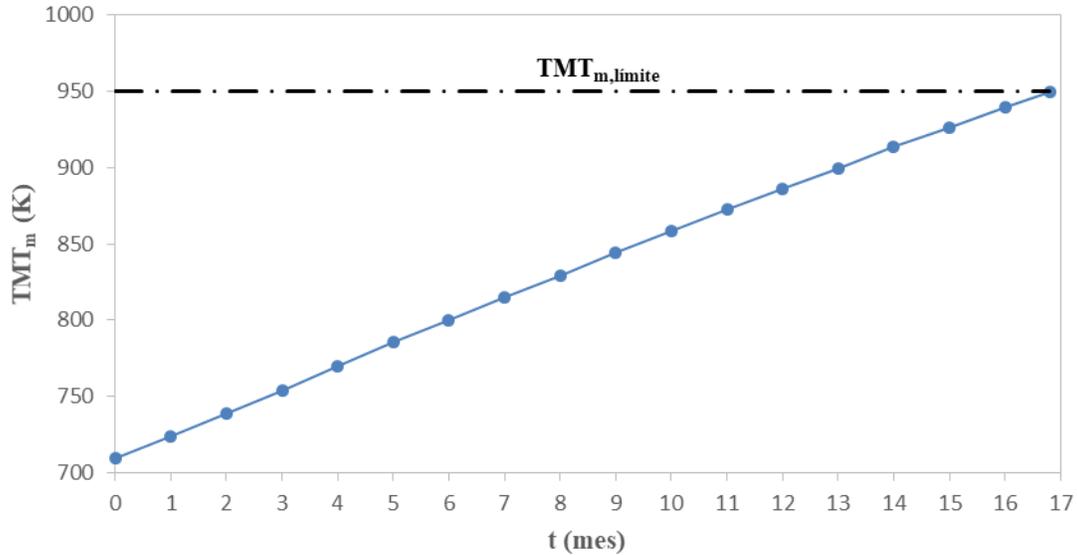


Fig. 5. 13. Temperatura de metal del tubo máxima contra el tiempo en la salida del tubo.

5.2.9. Campo de velocidad y temperatura en el tubo a lo largo del tiempo de operación

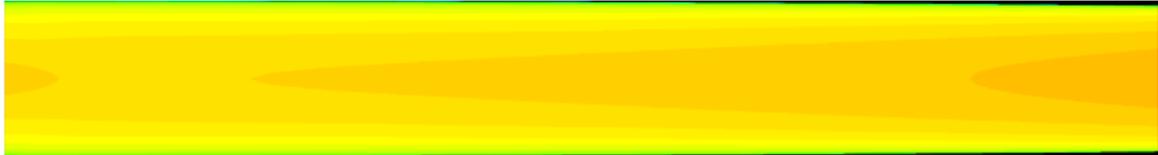
Los contornos de la velocidad y la temperatura en el tubo se muestran en la Fig. 5.14 y Fig. 5.15, respectivamente. Estos son por cada 4 meses desde el punto de inicio sin ensuciamiento hasta el apagado del calentador a fuego directo, en el tiempo operativo de 16.8 meses. El depósito y acumulación de la capa de ensuciamiento en la superficie interna del tubo, se logra con la malla dinámica que representa el crecimiento del dominio sólido. Este crecimiento de coque sólido disminuye la sección transversal a lo largo del tubo y provoca un incremento de la velocidad promedio, v_{ave} , debido a la conservación de la masa. La velocidad promedio es de 2.05 m/s al inicio de la operación del tubo del calentador a fuego directo, luego la velocidad es de 2.69 m/s en el tiempo operativo de 16.8 meses. La velocidad máxima, v_{max} , es de 2.2 m/s en la zona central del flujo de fluido al inicio de la operación del tubo del calentador a fuego directo, luego la velocidad máxima es de 2.86 m/s en el tiempo operativo de 16.8 meses. La temperatura promedio del petróleo aumenta desde la entrada de 673 K (400 °C) hasta la salida del tubo a 679.3 K (406.3 °C), un incremento de 6.3 K (°C), este valor se mantiene constante a lo largo del tiempo de operación debido a la conservación de la energía. Los contornos de temperatura muestran el

incremento del gradiente de temperatura dentro de la capa de ensuciamiento, a lo largo del tiempo de operación del calentador a fuego directo. El perfil del gradiente presenta un comportamiento lineal debido a que el tubo se estudia como un modelo 2D bidimensional y a que las propiedades de la capa de ensuciamiento se consideran constantes.

Tiempo = 0 s = 0 meses, $\xi_{fl}(25) = 0$ m, $v_{ave}(25) = 2.05$ m/s



Tiempo = 1.0368e7 s = 4 meses, $\xi_{fl}(25) = 0.0046$ m, $v_{ave}(25) = 2.19$ m/s



Tiempo = 2.0736e7 s = 8 meses, $\xi_{fl}(25) = 0.009$ m, $v_{ave}(25) = 2.33$ m/s



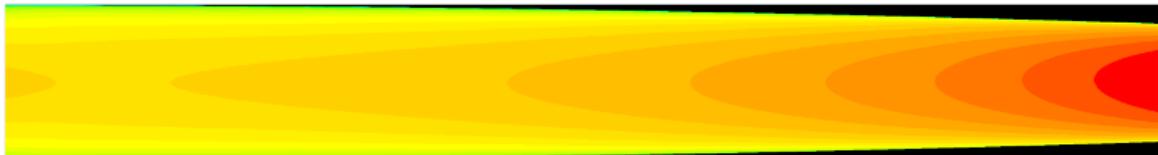
Tiempo = 3.1104e7 s = 12 meses, $\xi_{fl}(25) = 0.0132$ m, $v_{ave}(25) = 2.49$ m/s



Tiempo = 4.1472e7 s = 16 meses, $\xi_{fl}(25) = 0.0173$ m, $v_{ave}(25) = 2.65$ m/s



Tiempo = 4.35456e7 s = 16.8 meses, $\xi_{fl}(25) = 0.018$ m, $v_{ave}(25) = 2.69$ m/s



$x = 0$ m

$x = 12.5$ m

$x = 25$ m

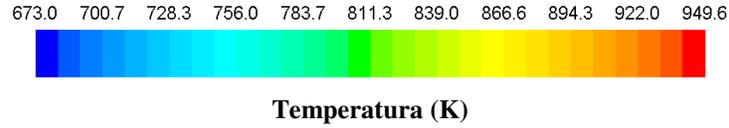


Fig. 5. 15. Contornos de temperatura en el tubo a lo largo del tiempo de operación.

5.2.10. Perfiles de velocidad a lo largo del tiempo de operación en la salida del tubo

Los perfiles de velocidad a la salida del tubo a lo largo del tiempo de operación se muestran en la Fig. 5.16. El diámetro interno se reduce a lo largo del tiempo debido a la capa de ensuciamiento. El perfil de velocidad es mayor en la zona central del tubo y es cero en las paredes debido a la condición de no deslizamiento. El uso de mallas dinámicas se ajusta mientras la capa de ensuciamiento (dominio sólido) crece dentro del dominio fluido. La velocidad máxima a lo largo del tiempo para 0, 4, 8, 12, 16 y 16.8 meses es 2.19, 2.34, 2.48, 2.64, 2.82 y 2.86 m/s, respectivamente.

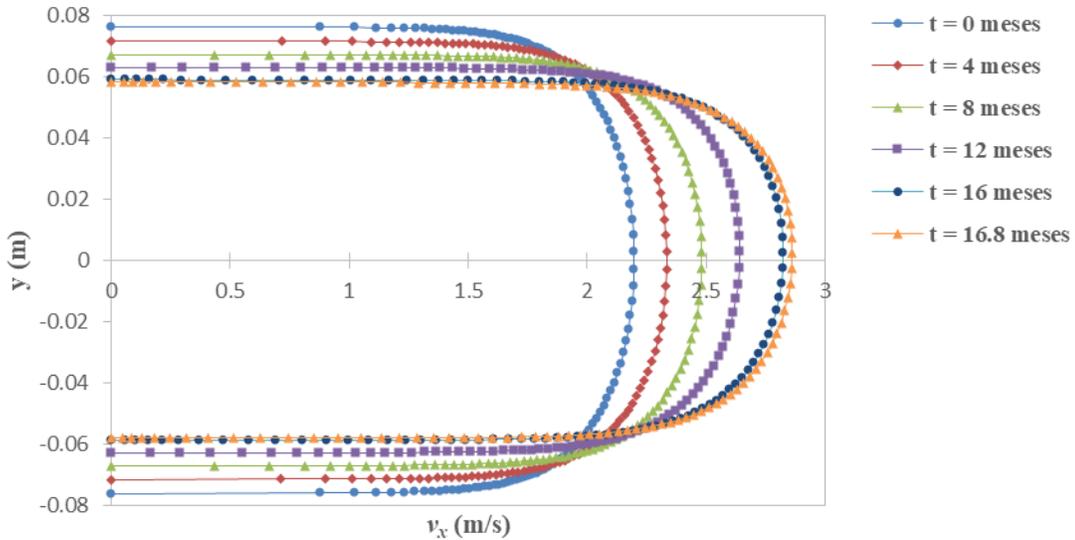


Fig. 5. 16. Perfiles de velocidad a lo largo del tiempo de operación en la salida del tubo.

CAPÍTULO VI

CONCLUSIONES

6.1. CONCLUSIONES

En este trabajo se estudió la formación de coque, el depósito de coque sólido y el crecimiento progresivo de la capa de ensuciamiento.

Las principales conclusiones son:

- Las mallas dinámicas hacen que el dominio sólido crezca de acuerdo con las reacciones químicas, la cinética química, la transferencia de calor y masa y el coque ubicado en la subcapa viscosa de la capa límite del flujo de fluido. El dominio del fluido disminuye mientras que la malla dinámica se adapta de acuerdo con las Funciones Definidas por el Usuario (UDFs) programadas para el modelo de ensuciamiento por coque.
- El incremento o disminución de la velocidad de ensuciamiento depende directamente de la temperatura de película del petróleo, la concentración del ensuciante (coque) en la capa límite y el equilibrio entre las fuerzas desarrolladas en el flujo.
- Una capa de ensuciamiento de 0.018 m hace que se alcance la temperatura de metal del tubo máxima límite, $TMT_{m, límite}$ ("punto caliente"), de 950 K (677 °C) en un tiempo operativo de 16.8 meses. Esta alta temperatura provoca que el calentador se

detenga debido a que es necesario eliminar la capa de ensuciamiento agregada en la superficie interna del tubo, de lo contrario, el ciclo de vida del tubo se reduciría o podría ocurrir una falla mecánica.

- Debido a la interacción que ocurre entre la reducción de la sección transversal, las resistencias térmicas por convección (pseudo-componentes) y conducción (capa de ensuciamiento) y la velocidad de flujo de masa, se recomienda que los calentadores a fuego directo operen bajo un velocidad de flujo de masa de petróleo igual o superior a $2000 \text{ kg/m}^2\text{-s}$, para disminuir la temperatura de película del petróleo, la formación de coque en la subcapa viscosa y la velocidad de coquización. Esto permite aumentar el tiempo de operación para obtener productos más valiosos y minimizar el sobrecalentamiento del metal del tubo y el riesgo de falla.

Finalmente, este trabajo ofrece un enfoque novedoso con el uso de la dinámica de fluidos computacional para predecir la formación y el crecimiento de la capa de ensuciamiento en la superficie interna del tubo de un calentador a fuego directo, mediante una descripción detallada del fenómeno involucrado.

6.2. APORTACIÓN DE LA TESIS

Este trabajo presenta como principal aportación la predicción del ensuciamiento por coque sobre la superficie interna del tubo de un calentador petroquímico a fuego directo. El ensuciamiento es estudiado a través de un enfoque de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD), el cual es representado como un sólido que se deposita y acumula para formar una capa que crece con el tiempo a la largo del tubo. El mecanismo de crecimiento de la capa de ensuciamiento se lleva a cabo mediante el acoplamiento del modelo de ensuciamiento con la técnica de malla dinámica, permitiendo controlar la interacción entre el dominio fluido y el dominio sólido a través de la modificación de la malla de la geometría del tubo.

El método de malla dinámica para representar el coque sólido depositado en la superficie interna del tubo, permite predecir la temperatura del metal del tubo (TMT), identificando "puntos calientes" y las temperaturas cercanas al límite de temperatura metalúrgica. De tal forma que el modelo empleado en este trabajo predice el tiempo operativo máximo, sin comprometer las propiedades metalúrgicas del material del tubo de los calentadores a fuego

directo, de acuerdo con los estándares internacionales para el diseño del proceso de desintegración térmica del petróleo en la industria de la refinación.

6.3. TRABAJO A FUTURO

Dado los alcances de este trabajo, se hace énfasis en el área de oportunidad que puede ser abordada como objeto de estudio a futuro como una línea de investigación mediante CFD, de tal forma que el estudio de este campo permita mejorar el desempeño de los calentadores a fuego directo para la industria de la refinación de petróleo. Estos puntos son:

1. Modelar en 2D una sección de tubería (serpentín-reactor) con condiciones de variables industriales en flujo multifásico para contemplar el cambio de fase, la separación de líquido-gas y la formación de coque, de manera que pueda evaluarse el efecto de la turbulencia en las curvas o codos U en la transferencia de calor, masa y momento. Acoplando el modelo multifásico con la técnica de malla dinámica para representar el ensuciamiento por coque sólido sobre la superficie interna del serpentín-reactor.
2. Desarrollar una simulación acoplada mediante un modelo 3D, tanto del lado gas de combustión como del lado proceso, para determinar el campo de flujo de los gases de combustión en el horno y los campos de temperatura en los tubos (serpentín-reactor); así como los perfiles de flujo de calor.
3. Implementar un modelo 3D multifásico para evaluar el ensuciamiento por coque sobre la superficie interna de una sección de tubería (serpentín-reactor), mediante la aplicación de perfiles de flujo de calor en la pared de la tubería y el acoplamiento de la técnica de malla dinámica. Éste análisis se puede extender para proponer diseños mejorados de tubería (serpentín-reactor) e incrementar el rendimiento en términos de la velocidad de coquización, caída de presión y temperatura de metal del tubo (TMT), de tal manera que aumente el tiempo de operación.

REFERENCIAS

- [1] Köseoğlu RÖ, Phillips CR. Hydrocracking of Athabasca bitumen: Kinetics of formation of gases. *Fuel* 1988;67:552–6.
- [2] Köseoğlu RÖ, Phillips CR. Kinetic models for the non-catalytic hydrocracking of Athabasca bitumen. *Fuel* 1988;67:906–15.
- [3] Köseoğlu RÖ, Phillips CR. Kinetics and product yield distributions in the CoOMoO₃Al₂O₃ catalysed hydrocracking of Athabasca bitumen. *Fuel* 1988;67:1411–6.
- [4] Köseoğlu RÖ, Phillips CR. Effect of reaction variables on the catalytic hydrocracking of Athabasca bitumen. *Fuel* 1988;67:1201–4.
- [5] Mendonça Filho LG. Modelagem e Simulação de Reator Trifásico Aplicado a Óleos Pesados com Reações de Hidrocraqueamento Térmico e Catalítico, Demetalização e Deposição de Coque na Mistura e no Catalisador. Tese de Mestrado, UNICAMP, Campinas, SP, Brazil, 1998.
- [6] Wiehe IA. Asphaltene solubility and fluid compatibility. *Energy & Fuels* 2012;26:4004–16.
- [7] Bennett CA. A Theory Describing Asphaltene Adhesion Fouling Inside Heat Exchanger Tubes. *Heat Transf Eng* 2012;33:1246–50.
- [8] Bennett CA, Appleyard S, Gough M, Hohmann RP, Joshi HM, King DC, et al. Industry-Recommended Procedures for Experimental Crude Oil Preheat Fouling Research. *Heat Transf Eng* 2006;27:28–35.
- [9] Speight J. *The Chemistry and Technology of Petroleum*. 4th Ed. Boca Raton: CRC Press; 2007.
- [10] Skogestad S, Gundersen T, Oddvar J. Compositional Simulation of a Refinery Coker Furnace - An Industrial Example of Two-Phase Flow with Chemical Reaction. *Model Identif Control* 1986;7:25–44.
- [11] Takatsuka T, Kajiyama R, Hashimoto H, Matsuo I, Hanazawa T. A tubular fouling model for residue cracking furnaces. *J Chem Eng Japan* 1989;22:149–54.
- [12] Plehiers PM, Reyniers GC, Froment GF. Simulation of the run length of an ethane cracking Furnace. *Ind Eng Chem Res* 1990;29:636–41.
- [13] Hottel HC, Sarofim AF. *Radiative Transfer*. New York: McGraw-Hill; 1967.
- [14] Martin GR. Vacuum Unit Fired Heater Coking - Avoid Unscheduled Shutdowns.

Pet Technol Q 2001;123–7.

[15] Heynderickx G, Oprins A, Marin G, Dick E. Three-dimensional flow patterns in cracking furnaces with long-flame burners. *AIChE J* 2001;47:388–400.

[16] Souza BA, Matos EM, Guirardello R, Nunhez JR. Predicting coke formation due to thermal cracking inside tubes of petrochemical fired heaters using a fast CFD formulation. *J Pet Sci Eng* 2006;51:138–48. <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2005.11.013>.

[17] Takatsuka T, Wada Y, Hirohama S, Fukui Y. A prediction model for dry sludge formation in residue hydroconversion. *J Chem Eng Japan* 1989;22:298–303.

[18] De Schepper SCK, Heynderickx GJ, Marin GB. Coupled simulation of the flue gas and process gas side of a steam cracker convection section. *AIChE J* 2009;55:2773–87.

[19] Bayat M, Aminian J, Bazmi M, Shahhosseini S, Sharifi K. CFD modeling of fouling in crude oil pre-heaters. *Energy Convers Manag* 2012;64:344–50. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2012.05.003>.

[20] Li C, Hu G, Zhong W, He W, Du W, Qian F. Coke deposition influence based on a run length simulation of a 1,2-dichloroethane cracker. *Ind Eng Chem Res* 2013;52:17501–16. <https://doi.org/10.1021/ie401265f>.

[21] Fontoura DVR, Matos EM, Nunhez JR. A three-dimensional two-phase flow model with phase change inside a tube of petrochemical pre-heaters. *Fuel* 2013;110:196–203. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2012.09.065>.

[22] Li XG, Zhang LH, Zhang RY, Sun YL, Jiang B, Luo MF, et al. CFD modeling of phase change and coke formation in petroleum refining heaters. *Fuel Process Technol* 2015;134:18–25. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2015.03.005>.

[23] Barletta T. Why vacuum unit fired heaters coke. *Pet Technol Q* 2002;7:123–8.

[24] API 560. Fired heaters for general refinery service. 5th Ed. Washington, DC.: American Petroleum Institute; 2016.

[25] Jones D, Pujadó P. *Handbook of Petroleum Processing*. Dordrecht, The Netherlands: Springer; 2006.

[26] Fahim MA, Al-Sahhaf TA, Elkilani A. *Fundamentals of Petroleum Refining*. Elsevier Science; 2009.

[27] Yang J, Tai N, Wang L, Xiao J, Yang C. Numerical simulation of the flue gas and process side of coking furnaces. *Ind Eng Chem Res* 2012;51:15440–7.

<https://doi.org/10.1021/ie302248m>.

- [28] Mercado ERL. Modelagem do Aquecimento de Fluidos com Escoamento em Tubos. Tese de Mestrado, UNICAMP, Campinas, SP, Brazil, 2000.
- [29] Panchal CB, Kuru WC, Liao CF, Ebert WA, Palen JW. Threshold conditions for crude oil fouling. Proc. Underst. Heat Exch. Fouling its Mitig., May 11-16, Pascoli, Italy: 1997, p. 273–273.
- [30] Incropera F, Dewitt D. Fundamentals of Heat and Mass Transfer. 5th ed. New York: John Wiley & Sons; 2002.
- [31] ANSYS FLUENT 15.0. Ansys Fluent Theory Guide. Canonsburg, PA, USA: ANSYS Inc.; 2013.
- [32] Batchelor GK. An Introduction to Fluid Dynamics. Cambridge, England.: Cambridge Univ. Press; 1967.
- [33] Menter FR. Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications. AIAA J 1994;32:1598–605.
- [34] Kern DQ, Seaton RE. A theoretical analysis of thermal surface fouling. Br Chem Eng 1959;4:258–62.
- [35] Müller-Steinhagen H. Heat transfer fouling: 50 years after the Kern and Seaton model. Heat Transf Eng 2011;32:1–13. <https://doi.org/10.1080/01457632.2010.505127>.
- [36] Deshannavar UB, Rafeen MS, Ramasamy M, Subbarao D. Crude oil fouling: A review. J Appl Sci 2010;10:3167–74.
- [37] Coletti F, Crittenden BD, Macchietto S. Basic Science of the Fouling Process. Elsevier Inc.; 2015.
- [38] Taler D, Taler J. Simple heat transfer correlations for turbulent tube flow. E3S Web Conf., vol. 13, 2017, p. 1–7. <https://doi.org/10.1051/e3sconf/20171302008>.
- [39] Sawarkar AN, Pandit AB, Samant SD, Joshi JB. Petroleum residue upgrading via delayed coking: A review. Can J Chem Eng 2007;85:1–24. <https://doi.org/10.1002/cjce.5450850101>.
- [40] Sánchez de la Rosa MÁ. Determinación de propiedades pseudocríticas de productos derivados del petróleo. Instituto Politécnico Nacional, 2016.
- [41] API 530. Calculation of Heater-Tube Thickness in Petroleum Refineries. 7th Ed. Washington, DC.: American Petroleum Institute; 2015.

- [42] Nelson WL. Petroleum Refinery Engineering. 4th ed. New York: McGraw-Hill; 1969.
- [43] ASTM D341-03. Standard Test Method for Viscosity-Temperature Charts for Liquid Petroleum Products. United States.: 2004.
- [44] Himmelblau DM. Principios básicos y cálculos en ingeniería química. 6a. ed. Edo. de México: Prentice-Hall Hispanoamericana; 1997.
- [45] Perry JH. Perry's Chemical Engineers' Handbook. 7th ed. New York: McGraw-Hill; 1997.
- [46] ANSYS FLUENT 15.0. Ansys Fluent User ' s Guide. Canonsburg, PA, USA: ANSYS Inc.; 2013.
- [47] Laufer J. The Structure of Turbulence in Fully Developed Pipe Flow. National Advisory Committee of Aeronautics 1174, National Aeronautics and Space Administration of The United States of America, Washington D.C.: 1952.
- [48] Ellis PJ, Paul CA. Tutorial: Delayed coking fundamentals. Prepared for Presentation at the AIChE 1998 Spring National Meeting, New Orleans, LA: 1998.

LISTA DE PUBLICACIONES

Participaciones selectas en congresos (trabajo en extenso y/o presentación):

Alfaro-Ayala J. A., Aranda-Ramirez A. K., López-Núñez O. A., Crespo-Quintanilla J.A., **Flores-Balderas J. N.**, “Simulación Numérica de un Calentador Solar Mediante la Dinámica de Fluidos Computacional”, XXXVIII Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química (Ixtapa Zihuatanejo, Gro., Mayo de 2017). (ISBN: 978-607-95593-5-9). Presentación Cartel.

Alfaro-Ayala J. A., Damian-Ascencio C. E., Cano-Andrade S., **Flores-Balderas J. N.**, López-Núñez O. A., “Análisis Numérico CFD de la Transferencia de Calor en Aletas con Geometrías Regulares”, XXXVIII Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química (Ixtapa Zihuatanejo, Gro., Mayo de 2017). (ISBN: 978-607-95593-5-9). Presentación Cartel.

López-Núñez O. A., Alfaro-Ayala J. A., Ramírez-Minguela J. D. J., Minchaca-Mojica J. I., **Flores-Balderas J. N.**, “Modelado Radiativo del Reflector Lineal Fresnel por Medio de Volumen Finito”, XXXIX Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química (San José del Cabo, BCS., Mayo de 2018). (ISBN: 978-607-95593-6-6). Presentación Oral.

Flores-Balderas J. N., Alfaro-Ayala J. A., Aguilera-Alvarado A. F., Uribe-Ramírez A. R., Ramírez-Minguela J. D. J., López-Núñez O. A., “Determinación del Ensuciamiento por Coque en la Tubería de un Horno de Desintegración Térmica de Petróleo Mediante CFD”, XXXIX Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química (San José del Cabo, BCS., Mayo de 2018). (ISBN: 978-607-95593-6-6). Presentación Cartel.

López-Núñez O. A., Alfaro-Ayala J. A., Ramírez-Minguela J. D. J., Balderas-Bernal J. A., Minchaca-Mojica J. I., Crespo-Quintanilla J.A., **Flores-Balderas J. N.**, “Estudio de Generación de Entropía en Calentador Solar de Tubos Evacuados”, XL Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química (Bahías de Huatulco, Oax., Mayo de 2019). (ISBN: En proceso). Presentación Oral.

Flores-Balderas J. N., Alfaro-Ayala J. A., Aguilera-Alvarado A. F., Uribe-Ramírez A. R., Ramírez-Minguela J. D. J., López-Núñez O. A., “Determinación Mediante CFD de la Deposición y Acumulación de Coque en la Tubería de un Calentador a Fuego Directo de Residuos de Petróleo”, XL Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química (Bahías de Huatulco, Oax., Mayo de 2019). (ISBN: En proceso). Presentación Cartel.

ANEXOS

ANEXO A. FUNCIONES DEFINIDAS POR EL USUARIO (UDFs)

A.1. Propiedades físicas, términos fuente para las especies (pseudo-componentes) y perfil de velocidad a la entrada del tubo

```

#include "udf.h"
#include "metric.h"
#include "mem.h"
#define R 8.314472          /*Gas universal constant [J/mol-K]*/
#define A 37.2564
#define B 14.2007
FILE *fout;
/*****
UDF for specifying a temperature-dependent viscosity property
*****/
DEFINE_PROPERTY(cell_viscosity, cell, thread)
{
    #if !RP_HOST
        real mu;
        real temp;
        temp = C_T(cell, thread);
        mu = (pow(10, pow(10, A - B*log10(temp))) - 0.7)*(1e-6)*C_R(cell, thread);
        return mu;
    #endif
}
/*****
UDF for specifying a temperature-dependent thermal conductivity property
*****/
DEFINE_PROPERTY(cell_thermal_conductivity, cell, thread)
{
    #if !RP_HOST
        real k;
        real temp;
        temp = C_T(cell, thread);
        k = 0.12984 - (5.6777e-5)*temp - (1.9482e-9)*pow(temp, 2);
        return k;
    #endif
}

```

```

        #endif
    }
/*****
UDF for specifying a temperature-dependent density property
*****/
DEFINE_PROPERTY(cell_density, cell, thread)
{
    #if !RP_HOST
        real rho;
        real temp;
        temp = C_T(cell, thread);
        rho = 1173.72 - (5.39048e-1)*temp + (1.77679e-6)*pow(temp, 2);
        return rho;
    #endif
}
/*****
UDF for specifying the diffusion coefficient
*****/
DEFINE_DIFFUSIVITY(mass_diffusivity, cell, thread, i)
{
    #if !RP_HOST
        real D;
        real temp;
        temp = C_T(cell, thread);
        D = C_MU_EFF(cell, thread)/C_R(cell, thread);
        return D;
    #endif
}
/*****
UDF for specifying source term for coke
*****/
DEFINE_SOURCE(coke_source, cell, thread, dS, eqn)
{
    #if !RP_HOST
        real cokesource;
        real Rho = C_R(cell, thread);
        real temp = C_T(cell, thread);
        real k_6 = (1. / 3600)*exp(27.54 - (168000. / (R*temp)));
        cokesource = k_6*C_YI(cell, thread, 1)*Rho;
    #endif
}

```

```

    return cokesource;
#endif
}
/*****
UDF for specifying source term for asphaltenes mesophase
*****/
DEFINE_SOURCE(asphmeso_source, cell, thread, dS, eqn)
{
    #if !RP_HOST
    real asphmesosource;
    real Rho = C_R(cell, thread);
    real temp = C_T(cell, thread);
    real k_4 = (1. / 3600)*exp(17.07 - (96000. / (R*temp)));
    real k_5 = (1. / 3600)*exp(19.34 - (103000. / (R*temp)));
    real k_6 = (1. / 3600)*exp(27.54 - (168000. / (R*temp)));
    asphmesosource = k_4*C_YI(cell, thread, 3)*Rho - (k_5 + k_6)*C_YI(cell,
thread, 1)*Rho;
    return asphmesosource;
#endif
}
/*****
UDF for specifying source term for soluble asphaltenes
*****/
DEFINE_SOURCE(asphsol_source, cell, thread, dS, eqn)
{
    #if !RP_HOST
    real asphsolsource;
    real Rho = C_R(cell, thread);
    real temp = C_T(cell, thread);
    real k_4 = (1. / 3600)*exp(17.07 - (96000. / (R*temp)));
    real k_5 = (1. / 3600)*exp(19.34 - (103000. / (R*temp)));
    asphsolsource = k_4*C_YI(cell, thread, 3)*Rho - k_5*C_YI(cell, thread,
2)*Rho;
    return asphsolsource;
#endif
}
/*****
UDF for specifying source term for resins
*****/

```

```

DEFINE_SOURCE(resins_source, cell, thread, dS, eqn)
{
    #if !RP_HOST
        real resinssource;
        real Rho = C_R(cell, thread);
        real temp = C_T(cell, thread);
        real k_3 = (1. / 3600)*exp(13.57 - (85000. / (R*temp)));
        real k_4 = (1. / 3600)*exp(17.07 - (96000. / (R*temp)));
        real k_5 = (1. / 3600)*exp(19.34 - (103000. / (R*temp)));
        resinssource = k_5*(C_YI(cell, thread, 2)*Rho + C_YI(cell, thread, 1)*Rho) -
(k_3 + 2 * k_4)*C_YI(cell, thread, 3)*Rho;
        return resinssource;
    #endif
}

/*****
UDF for specifying source term for aromatics
*****/
DEFINE_SOURCE(aromatics_source, cell, thread, dS, eqn)
{
    #if !RP_HOST
        real aromaticssource;
        real Rho = C_R(cell, thread);
        real temp = C_T(cell, thread);
        real k_2 = (1. / 3600)*exp(23.43 - (136000. / (R*temp)));
        real k_3 = (1. / 3600)*exp(13.57 - (85000. / (R*temp)));
        aromaticssource = k_3*C_YI(cell, thread, 3)*Rho - k_2*C_YI(cell, thread,
4)*Rho;
        return aromaticssource;
    #endif
}

/*****
UDF for specifying source term for saturated
*****/
DEFINE_SOURCE(saturated_source, cell, thread, dS, eqn)
{
    #if !RP_HOST
        real saturatedsource;
        real Rho = C_R(cell, thread);
        real temp = C_T(cell, thread);

```

```

real k_1 = (1. / 3600)*exp(29.9 - (175000. / (R*temp)));
real k_2 = (1. / 3600)*exp(23.43 - (136000. / (R*temp)));
saturatedsource = k_2*C_YI(cell, thread, 4)*Rho - k_1*C_YI(cell, thread,
5)*Rho;
return saturatedsource;
#endif
}
/*****
UDF for specifying source term for distillate
*****/
DEFINE_SOURCE(distillate_source, cell, thread, dS, eqn)
{
    #if !RP_HOST
    real distillatesource;
    real Rho = C_R(cell, thread);
    real temp = C_T(cell, thread);
    real k_1 = (1. / 3600)*exp(29.9 - (175000. / (R*temp)));
    distillatesource = k_1*C_YI(cell, thread, 5)*Rho;
    return distillatesource;
    #endif
}
/*****
UDF for specifying the sum of source terms
*****/
DEFINE_SOURCE(sum_source, cell, thread, dS, eqn)
{
    #if !RP_HOST
    real sumsource;
    real Rho = C_R(cell, thread);
    real temp = C_T(cell, thread);
    real k_1 = (1. / 3600)*exp(29.9 - (175000. / (R*temp)));
    real k_2 = (1. / 3600)*exp(23.43 - (136000. / (R*temp)));
    real k_3 = (1. / 3600)*exp(13.57 - (85000. / (R*temp)));
    real k_4 = (1. / 3600)*exp(17.07 - (96000. / (R*temp)));
    real k_5 = (1. / 3600)*exp(19.34 - (103000. / (R*temp)));
    real k_6 = (1. / 3600)*exp(27.54 - (168000. / (R*temp)));
    sumsource = k_6*C_YI(cell, thread, 1)*Rho + k_4*C_YI(cell, thread, 3)*Rho -
(k_5 + k_6)*C_YI(cell, thread, 1)*Rho + k_4*C_YI(cell, thread, 3)*Rho -
k_5*C_YI(cell, thread, 2)*Rho + k_5*(C_YI(cell, thread, 2)*Rho + C_YI(cell, thread,

```

```

1)*Rho) - (k_3 + 2 * k_4)*C_YI(cell, thread, 3)*Rho + k_3*C_YI(cell, thread, 3)*Rho
- k_2*C_YI(cell, thread, 4)*Rho + k_2*C_YI(cell, thread, 4)*Rho - k_1*C_YI(cell,
thread, 5)*Rho + k_1*C_YI(cell, thread, 5)*Rho;
    return sumsource;
#endif
}
/*****
UDF for define the velocity profile
*****/
DEFINE_PROFILE(inlet_x_velocity, thread, position)
{
    #if !RP_HOST
    real x[ND_ND]; /* this will hold the position vector */
    real Re, fr, v_average, L, Ra, mu_f, DP, K;
    real temp_f = 691; /*Film temperature of the wall temperature and the tube
entrance temperature*/
    real Rho_f = 1173.72 - (5.39048e-1)*temp_f + (1.77679e-6)*pow(temp_f, 2);
    face_t f;
    mu_f = (pow(10, pow(10, A - B*log10(temp_f)))) - 0.7)*(1e-6)*Rho_f;
    Ra = 0.07619; /* Tube radius in m*/
    L = 25; /* Tube length in m*/
    v_average = 2; /*axial velocity average m/s*/
    Re = (Rho_f*v_average * 2 * Ra) / mu_f;
    if (Re <= 20000 && Re >= 3000)
    {
        fr = 0.316 / pow(Re, 0.25);
    }
    else
    {
        fr = 0.184 / pow(Re, 0.2);
    }
    DP = (fr*Rho_f*pow(v_average, 2)*L) / (4 * Ra);
    K = DP / L; /* Pressure gradient Pa/m*/
    begin_f_loop(f, thread)
    {
        F_CENTROID(x, f, thread);
        F_PROFILE(f, thread, position) = 12.85*pow((K*Ra) / (2 * Rho_f), 0.5) +
pow((K*Ra) / (0.32*Rho_f), 0.5)*log((Ra - ABS(x[1])) / (26 * (mu_f / Rho_f)*pow((2 *
Rho_f) / (K*Ra), 0.5)));
    }
    }

```

```

    }
    end_f_loop(f, thread)
  #endif
}

```

A.2. Calculo de la velocidad de coquización, incremento del espesor de la capa de ensuciamiento y movimiento de las mallas dinámicas

```

#include "udf.h"
#include "metric.h"
#include "mem.h"
#include "sg.h"
FILE *fout;
DEFINE_EXECUTE_AT_END(thickness_sup)
{
  #if !RP_HOST
    Domain *d;
    Thread *t, *ts, *t0;
    cell_t c, c0;
    face_t f, fs;
    Node *v, *vs;
    int n, ns;
    real Kc = 0.004915; /*mass transfer coefficient, m/s*/
    real coke, cokingmaterialflux, tc, Rho_c = 1600; /*density of fouling layer
kg/m3*/
    d = Get_Domain(1);
    t = Lookup_Thread(d, 17);
    begin_f_loop(f, t)
    {
      c0 = F_C0(f, t);
      t0 = THREAD_T0(t);
      coke = C_YI(c0, t0, 0);
      cokingmaterialflux = C_R(c0, t0)*Kc*coke;
      tc = (cokingmaterialflux / Rho_c)*CURRENT_TIMESTEP;
      f_node_loop(f, t, n)
      {
        v = F_NODE(f, t, n);
        N_UDMI(v, 0) = tc;

```

```

        }
        ts = THREAD_SHADOW(t);
        fs = F_SHADOW(f, t);
        f_node_loop(fs, ts, ns)
        {
            vs = F_NODE(fs, ts, ns);
            N_UDMI(vs, 1) = tc;
        }
    }
    end_f_loop(f, t)
#endif
}
DEFINE_GRID_MOTION(zona_coke_nodo_sup, domain, dt, time, dtime)
{
    #if !RP_HOST
        Thread *t;
        face_t f;
        Node *v;
        int n;
        t = DT_THREAD(dt);
        begin_f_loop(f, t)
        {
            f_node_loop(f, t, n)
            {
                v = F_NODE(f, t, n);
                if (NODE_POS_NEED_UPDATE(v))
                {
                    NODE_POS_UPDATED(v);
                    NODE_Y(v) = NODE_Y(v) - N_UDMI(v, 0);
                }
            }
        }
        end_f_loop(f, t)
    #endif
}
DEFINE_GRID_MOTION(zona_coke_nodo_sup_shadow, domain, dt, time, dtime)
{
    #if !RP_HOST
        Thread *t;

```

```

face_t f;
Node *v;
int n;
t = DT_THREAD(dt);
begin_f_loop(f, t)
{
    f_node_loop(f, t, n)
    {
        v = F_NODE(f, t, n);
        if (NODE_POS_NEED_UPDATE(v))
        {
            NODE_POS_UPDATED(v);
            NODE_Y(v) = NODE_Y(v) - N_UDMI(v, 1);
        }
    }
}
end_f_loop(f, t)
#endif
}
DEFINE_EXECUTE_AT_END(thickness_inf)
{
#if !RP_HOST
    Domain *d;
    Thread *t, *ts, *t0;
    cell_t c, c0;
    face_t f, fs;
    Node *v, *vs;
    int n, ns;
    real Kc = 0.004915; /*mass transfer coefficient, m/s*/
    real coke, cokingmaterialflux, tc, Rho_c = 1600; /*density of fouling layer
kg/m3*/
    d = Get_Domain(1);
    t = Lookup_Thread(d, 38);
    begin_f_loop(f, t)
    {
        c0 = F_C0(f, t);
        t0 = THREAD_T0(t);
        coke = C_YI(c0, t0, 0);
        cokingmaterialflux = C_R(c0, t0)*Kc*coke;
    }
}

```

```

    tc = (cokingmaterialflux / Rho_c)*CURRENT_TIMESTEP;
    f_node_loop(f, t, n)
    {
        v = F_NODE(f, t, n);
        N_UDMI(v, 2) = tc;
    }
    ts = THREAD_SHADOW(t);
    fs = F_SHADOW(f, t);
    f_node_loop(fs, ts, ns)
    {
        vs = F_NODE(fs, ts, ns);
        N_UDMI(vs, 3) = tc;
    }
}
end_f_loop(f, t)
#endif
}
DEFINE_GRID_MOTION(zona_coke_nodo_inf, domain, dt, time, dtime)
{
    #if !RP_HOST
        Thread *t;
        face_t f;
        Node *v;
        int n;
        t = DT_THREAD(dt);
        begin_f_loop(f, t)
        {
            f_node_loop(f, t, n)
            {
                v = F_NODE(f, t, n);
                if (NODE_POS_NEED_UPDATE(v))
                {
                    NODE_POS_UPDATED(v);
                    NODE_Y(v) = NODE_Y(v) + N_UDMI(v, 2);
                }
            }
        }
    }
    end_f_loop(f, t)
#endif
}

```

```

}
DEFINE_GRID_MOTION(zona_coke_nodo_inf_shadow, domain, dt, time, dtime)
{
#ifdef !RP_HOST
    Thread *t;
    face_t f;
    Node *v;
    int n;
    t = DT_THREAD(dt);
    begin_f_loop(f, t)
    {
        f_node_loop(f, t, n)
        {
            v = F_NODE(f, t, n);
            if (NODE_POS_NEED_UPDATE(v))
            {
                NODE_POS_UPDATED(v);
                NODE_Y(v) = NODE_Y(v) + N_UDMI(v, 3);
            }
        }
    }
    end_f_loop(f, t)
#endif
}
DEFINE_ON_DEMAND(on_demand_calc_1)
{
#ifdef !RP_HOST
    Domain *d;
    Thread *t, *t0;
    cell_t c, c0;
    face_t f;
    real x[ND_ND]; /* this will hold the position vector */
    real Kc = 0.004914; /*mass transfer coefficient, m/s*/
    real coke, cokingmaterialflux, Tf, e_c, Rho_c = 1600, Position_x; /*density of
fouling layer kg/m3*/
    fout = fopen("Tem-pelricula.txt", "w");
    d = Get_Domain(1);
    t = Lookup_Thread(d, 17);
    begin_f_loop(f, t)

```

```

{
    c0 = F_C0(f, t);
    t0 = THREAD_T0(t);
    coke = C_YI(c0, t0, 0);
    Tf = F_T(f, t); /*Oil film temperature*/
    cokingmaterialflux = C_R(c0, t0)*Kc*coke;
    F_CENTROID(x, f, t);
    e_c = 0.0762 - x[1];
    Position_x = x[0];
    fprintf(fout, "%g %g %g %g %g\n", Position_x, Tf,
cokingmaterialflux, e_c, coke);
}
end_f_loop(f, t)
fclose(fout);
#endif
}
DEFINE_ON_DEMAND(on_demand_calc_2)
{
#if !RP_HOST
    Domain *d;
    Thread *t;
    cell_t c;
    face_t f;
    real x[ND_ND]; /* this will hold the position vector */
    real TMT, Position_x;
    fout = fopen("TMT.txt", "w");
    d = Get_Domain(1);
    t = Lookup_Thread(d, 9);
    begin_f_loop(f, t)
    {
        F_CENTROID(x, f, t);
        Position_x = x[0];
        TMT = F_T(f, t); /*Tube metal temperature*/
        fprintf(fout, "%g %g\n", Position_x, TMT);
    }
    end_f_loop(f, t)
    fclose(fout);
#endif
}

```

```
DEFINE_ON_DEMAND(on_demand_calc_3)
{
  #if !RP_HOST
    Domain *d;
    Thread *t, *t0;
    cell_t c, c0;
    face_t f;
    real x[ND_ND]; /* this will hold the position vector */
    real D, Position_x, k_L;
    fout = fopen("k-L.txt", "w");
    d = Get_Domain(1);
    t = Lookup_Thread(d, 17);
    begin_f_loop(f, t)
    {
      c0 = F_C0(f, t);
      t0 = THREAD_T0(t);
      F_CENTROID(x, f, t);
      Position_x = x[0]; /*x position*/
      D = 2.*x[1]; /*Internal diameter*/
      k_L = C_K_L(c0, t0); /*thermal conductivity*/
      fprintf(fout, "%g %g %g\n", Position_x, D, k_L);
    }
    end_f_loop(f, t)
    fclose(fout);
  #endif
}
```