

5º CONGRESSO BRASILEIRO DE PESQUISA E DESENVOLVIMENTO EM PETRÓLEO E GÁS



TÍTULO DO TRABALHO:

Estudo de Sensibilidade Paramétrica na Modelagem de um Forno de Craqueamento Térmico

AUTORES:

A.G.C. Rosal, S. Lucena, L.M.X. Silva, R.G. Melo, C.C.M. Marques

INSTITUIÇÃO:

Universidade Federal de Pernambuco

Este Trabalho foi preparado para apresentação no 5º Congresso Brasileiro de Pesquisa e Desenvolvimento em Petróleo e Gás- 5º PDPETRO, realizado pela Associação Brasileira de P&D em Petróleo e Gás-ABPG, no período de 15 a 22 de outubro de 2009, em Fortaleza-CE. Esse Trabalho foi selecionado pelo Comitê Científico do evento para apresentação, seguindo as informações contidas no documento submetido pelo(s) autor(es). O conteúdo do Trabalho, como apresentado, não foi revisado pela ABPG. Os organizadores não irão traduzir ou corrigir os textos recebidos. O material conforme, apresentado, não necessariamente reflete as opiniões da Associação Brasileira de P&D em Petróleo e Gás. O(s) autor(es) tem conhecimento e aprovação de que este Trabalho seja publicado nos Anais do 5ºPDPETRO.

ESTUDO DE SENSIBILIDADE PARAMÉTRICA NA MODELAGEM DE UM FORNO DE CRAQUEAMENTO TÉRMICO

Abstract

Nowadays, one of the main challenges of petrol industry is to adapt the refinery design for the refining of heavy oils and to the changes in the profile of the demanded products. In this situation the “bottom of barrel” processes show themselves to be essential at the sustainability of the refineries. The Delayed coking unit is responsible for conversion of heavy fractions of petrol into light fuels, which have higher value, making this unit very profitable. Despite this fact, the delayed coking unit is one of the most difficult to operate and control. The furnace is the main equipment of the unit because it is responsible for the supply of thermal energy demanded by the thermal cracking of the hydrocarbon molecules. The present paper has the objective of develop a mathematical modeling of the thermal cracking furnace and then do a parametric sensitivity analysis of the developed model. The kinetic model is based on an irreversible first order reaction and due to the high velocities of the feed in the furnace; the velocity profile can be approached as a plug flow. The development of the model results in a set of partial differential equations, which was implemented into a computational code capable of predicting the dynamic profiles of temperature at the equipment, the yields of light fuels and the profile of coke deposition along the ducts. The variables and parameters which are more influent at the responses of the model to disturbances will be determined by the sensitivity analysis. This result will led to development of better advanced control strategies such as: building software sensors and data reconciliation.

Introdução

Os investimentos em processos de refino capazes de converter frações pesadas de petróleo em derivados mais leves e rentáveis tornam-se imprescindíveis no mercado brasileiro, devido às alterações no perfil de demanda de derivados e a produção crescente de óleos mais pesados, assim como a descoberta de novas reservas desse tipo de óleo. Dessa forma, tecnologias para processamento de frações residuais de petróleo mostram-se fundamentais para a sobrevivência das refinarias cujas margens tornam-se progressivamente mais reduzidas (FILIPAKIS *et al.*, 2008).

A unidade de coqueamento retardado (UCR) é responsável por converter as frações pesadas do petróleo em produtos de maior valor agregado, especialmente, em diesel. Nas refinarias brasileiras, este processo vem ganhando destaque, devido à flexibilidade em processar diferentes tipos de carga com menor investimento do que os outros processos de conversão. Normalmente, a unidade de coqueamento é constituída por três equipamentos básicos: a coluna fracionadora, o forno de coqueamento e os tambores de coque (MOREIRA *et al.*, 2008).

O forno de coqueamento constitui-se como o principal equipamento da unidade de coqueamento retardado, por fornecer à energia térmica necessária as reações de craqueamento térmico das moléculas de hidrocarbonetos. As reações de craqueamento ocorrem através da associação dos mecanismos via radicais livres e de polimerização das olefinas, sendo a formação de coque justificada por este último (SUGAYA, 1994).

O presente trabalho teve com objetivos realizar a modelagem matemática do forno de craqueamento térmico, e posteriormente fazer uma análise de sensibilidade paramétrica do modelo desenvolvido. Determinando assim quais variáveis e parâmetros que têm uma maior influência no modelo matemático do forno, frente a diferentes perturbações do processo, visando posteriormente o desenvolvimento de estratégias de controle avançado.

Metodologia

A metodologia empregada no trabalho consiste basicamente em três etapas que são: modelagem cinética do processo de craqueamento térmico, a modelagem dinâmica do forno de coque e por fim a aplicação da análise de sensibilidade para determinar o efeito de alguns parâmetros do processo numa resposta particular.

Modelagem Cinética

Devido à complexidade e ao elevado número de componentes que constituem as frações de petróleo, a caracterização é feita, em geral, com o menor número de pseudocomponentes que possa representar a mistura de maneira significativa. Na modelagem cinética das reações de craqueamento térmico, os componentes com propriedades semelhantes são agrupados em *lumps*, onde o fracionamento ocorre de acordo com as faixas de temperatura dos mesmos.

A representação do sistema reacional é, conseqüentemente, melhor quanto maior for a quantidade de *lumps*, entretanto, a complexidade da modelagem e o número de parâmetros a ser obtidos aumentam consideravelmente.

O modelo cinético usado foi proposto por SUGAYA (1994), sendo constituído por uma reação irreversível de primeira ordem com 16 *lumps*. Na caracterização desse modelo reacional de 24 pseudocomponentes, 10 são gases e 14 são cortes (nafta, gasóleo, diesel, resíduo) contidos na faixa de 75°C a 550+°C. A cinética de primeira ordem utilizada para descrever o modelo cinético são reações descritas pelas Equações de (1) a (8):

$$\frac{dC_{\text{carga}}}{dt} = -kC_{\text{carga}} \quad (1)$$

$$C_{\text{produtos}} = 1 - C_{\text{carga}} \quad (2)$$

$$C_{\text{carga}} = C_{\text{gasóleos}} + C_{\text{resíduo}} \quad (3)$$

$$C_{\text{gasóleos}} = C_{350-400} + C_{400-450} + C_{450-475} + C_{475-500} + C_{500-550} \quad (4)$$

$$C_{\text{resíduo}} = C_{500+} \quad (5)$$

$$C_{\text{produtos}} = C_{\text{gases}} + C_{\text{nafta}} + C_{\text{diesel}} \quad (6)$$

$$C_{\text{gases}} = C_{\text{H}_2} + C_{\text{H}_2\text{S}} + C_{\text{C}_1} + C_{\text{C}_2=} + C_{\text{C}_2} + C_{\text{C}_3=} + C_{\text{C}_3} + C_{\text{C}_4=} + C_{\text{iC}_4} + C_{\text{nC}_4} \quad (7)$$

$$C_{\text{nafta}} = C_{5-75} + C_{75-125} + C_{125-150} + C_{150-185} + C_{185-204} \quad (8)$$

$$C_{\text{diesel}} = C_{204-250} + C_{250-300} + C_{300-350} \quad (9)$$

Modelagem do Forno

A modelagem matemática do forno de craqueamento térmico é feita através dos balanços de massa e energia, e pelo cálculo de temperatura nas paredes do tubo, aproximando o comportamento deste equipamento como sendo o de um reator tubular bifásico devido às elevadas velocidades de escoamento.

Dessa forma, o modelo dinâmico do forno de craqueamento foi desenvolvido tendo como base os modelos estacionários de SUGAYA (1994) e MATEUS (2008), portanto, o mesmo é representado por um sistema de equações diferenciais parciais apresentado pelas Equações (10) a (12).

$$\frac{dC_{350}}{dt} = \frac{G_T^2}{A_T(\rho_v G_v + \rho_L G_L)} \cdot \frac{dC_{350}}{dx} + KC_{350} G_T \frac{(\rho_L h_L + \rho_v h_v)}{(\rho_L G_L + \rho_v G_v)} \quad (10)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{A_T} \cdot \left(\frac{G_L C_{PL} + G_v C_{Pv}}{\rho_L C_{PL} + \rho_v C_{Pv}} \right) \frac{dT}{dx} + \frac{KC_{350} A_T h_L \Delta H_i}{(\rho_L C_{PL} + \rho_v C_{Pv})} - \frac{\pi DU_{TP}(T_w - T)}{A_T(\rho_L C_{PL} + \rho_v C_{Pv})} \quad (11)$$

$$\frac{dT_w}{dx} = \frac{\pi DU_{TP}(T - T_w)}{K_w S} dx + \frac{\pi DQ}{K_w S} dx \quad (12)$$

Algumas correlações usadas no cálculo das propriedades físicas na modelagem dinâmica do forno encontram-se na Tabela 1.

Tabela 1 – Propriedades físicas usadas na modelagem.

Propriedade	Fase Líquida	Fase Vapor
Densidade	Hankinson-Thomson (1979)	SRK
Viscosidade	Kendall-Monroe (1917)	Bromley-Wilke (1951)
Condutividade	API TDB (1997) – 12A2.1	API TDB (1997) – 12B2.1

Sensibilidade Paramétrica

O estudo de sensibilidade paramétrica é de grande importância na compreensão do comportamento de um sistema, quando sujeito a alterações de estado. Podendo ser realizado através dos métodos direto e perturbativos.

O método direto é realizado através da construção da curva-resposta, na qual se varia o parâmetro de interesse e mantém os demais fixos. Na obtenção do parâmetro mais sensível do sistema, calcula-se o valor da variável resposta para cada variação do parâmetro estudado, tornando o processo bastante trabalhoso. Enquanto que o método perturbativo tem como vantagens, maior facilidade e

rapidez dos resultados, principalmente quando a solução numérica do sistema é bem onerosa sob o ponto de vista computacional (SILVA, 2007).

As formulações do método perturbativo na análise de sensibilidade levam às mesmas expressões para o coeficiente de sensibilidade, sendo divididas de acordo com a abordagem usada na derivação. Dessa forma, têm-se três formalismos:

- **Método da teoria da perturbação generalizada:** faz uso exclusivo da conservação da função importância.
- **Método variacional:** tem como característica a minimização da variável de interesse.
- **Método diferencial:** baseado na diferenciação do funcional resposta considerado.

Resultados e Discussão

Na modelagem das reações químicas envolvendo as frações de petróleo, a caracterização foi feita mediante a utilização dos pseudocomponentes e *lumps*, tendo como partida o modelo reacional desenvolvido por SUGAYA (1994). Enquanto que o modelo dinâmico desenvolvido para o forno tomou como base os modelos estacionários desenvolvidos por SUGAYA (1994) e MATEUS (2008).

Como o modelo matemático desenvolvido para o forno de craqueamento térmico envolve a utilização de EDP's, utilizou-se o Método das Linhas para transformar as EDP's em um sistema de equações diferenciais ordinárias na sua implementação. Dessa forma, o sistema de EDO's foi resolvido usando um algoritmo do tipo Runge-Kutta.

A análise de sensibilidade do sistema foi baseada no método perturbativo devido à complexidade do sistema estudado. Não fazendo uso, portanto, do método direto que constrói a curva-resposta.

Assim, o estudo de sensibilidade dos parâmetros do forno de coqueamento retardado foi realizado através de simulações, onde foram introduzidos os principais tipos de perturbações citados na literatura. Os parâmetros com maior influência no comportamento dinâmico do forno foram utilizados no desenvolvimento de uma função objetivo para otimização do processo. Normalmente, a função objetivo tem como meta maximizar o tempo de produção ou minimizar o gasto de energia para obtenção do produto dentro das especificações.

Na análise de sensibilidade paramétrica duas grandezas são de grande importância: o coeficiente de sensibilidade e a sensibilidade, sendo estas descritas pelas Equações (13) e (14).

- Coeficiente de sensibilidade: obtido de forma aproximada através de uma escolha prévia de variações de parâmetros.

$$cs = \frac{\delta R}{\delta P_i} = \frac{R_{(po+n\%po)} - R_{(po-n\%po)}}{(Po + n\%Po) - (Po - n\%Po)} \quad (13)$$

Onde, δR representa a variação da resposta, δP_i representa a variação do parâmetro genérico e n é o incremento usado.

- Sensibilidade: coeficiente relativo aos valores não perturbados do parâmetro e da variável estudada.

$$S_i = \frac{\delta R}{\delta P_i} \cdot \left| \frac{P_{o_i}}{R_o} \right| \quad (14)$$

Onde, P_{o_i} representa o parâmetro de referência i , e R_o é o valor da resposta de referência.

A análise de sensibilidade permitiu observar o comportamento de diversas variáveis quando submetidas a perturbações e conseqüentemente a dinâmica do forno. Assim, espera-se, posteriormente, aplicar as estratégias de controle avançado no processo estudado, tais como a construção de inferenciadores e a reconciliação de dados.

Conclusões

O desenvolvimento do presente trabalho deve permitir a análise de sensibilidade paramétrica para ajustar o modelo dinâmico desenvolvido para o forno. Determinando assim quais as variáveis e parâmetros têm uma maior influência no modelo matemático do forno de craqueamento térmico, frente a diferentes perturbações do processo, visando posteriormente o desenvolvimento de estratégias de controle avançado. Atualmente, a implementação do modelo matemático encontra-se em andamento, e os resultados da simulação dinâmica frente a diferentes perturbações serão obtidos brevemente.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao PRH 28 e ao Laboratório de Controle e Otimização de Processos (LACO-UFPE).

Nomenclatura

A_T - área da secção transversal	[m ²]
C_i - fração mássica do componente i	[adimensional]
C_p - capacidade calorífica	[Kj/Kg K]
D - diâmetro do forno de coqueamento	[m]
G - vazão mássica	[kg/s]
h - hold up da fase	[adimensional]
K_w - condutividade térmica da tubulação	[W/m K]
Q - fluxo de calor	[W/m ²]
T - temperatura	[K]
T_w - Temperatura da parede dos tubos	[K]
U_{TP} - coeficiente global de transferência de calor entre as fases	[W/m ² K]

Referências Bibliográficas

API “**Technical Data Book-Petroleum Refining**”. American Petroleum Institute, 6Th edition, 1997.

BROMLEY, L. A. & WILKE, C. R.. **Viscosity behavior of gases**. Ind. Eng. Chem., 43, 1641-1648, 1951.

FILIPAKIS, S.D., SILVA, M.S.A.J., GUIMARÃES, R.C.L.. **Estimativa da qualidade e dos rendimentos de produtos de coqueamento a partir do processamento de petróleos nacionais**. In: Rio Oil & Gas Expo and Conference, 2008.

KENDALL, J. & MONROE, K. P.. **The viscosity of liquids. 2. The viscosity composition curve for ideal liquid mixtures**. J. American Chemical Society, 39, 9, 1917.

MATEUS, F.A.D.. **Desenvolvimento de modelo computacional para craqueamento térmico**. Dissertação de Mestrado/ Unicamp, 2008.

MOREIRA, F.S., SEIDL, P.R., GUIMARÃES, M.J.O.C.. **A importância das novas unidades de coqueamento retardado no mercado de combustíveis**. In: Rio Oil & Gas Expo and Conference, 2008.

SILVA, G.L.. **Análise de sensibilidade no comportamento dinâmico de pressurizadores de reatores PWR**. Dissertação de Mestrado/ UFPE, 2007.

SUGAYA, M.F.. **Cinética e modelagem craqueamento térmico de frações residuais de petróleo**. Dissertação de Mestrado/ Unicamp, 1994.