

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



## TÍTULO DO TRABALHO:

Modelagem e Simulação de uma fornalha de Coqueamento Retardado

## AUTORES:

L.M.X. Silva , S. Lucena, A.G.C. Rosal, 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.*

## MODELAGEM MATEMÁTICA PARA UMA FORNALHA DE UMA UNIDADE DE COQUEAMENTO RETARDADO

### Abstract

The Delayed Coking Furnaces are the equipment responsible for the heat supply needed by the thermal cracking reactions at a Delayed Coking Unit. These reactions are the basis at the conversion of heavy fraction of petrol in light fuels. The mathematical modeling and simulation were used for developing a computational code capable of calculating the yields dynamically. The velocity profile was approached as plug flow due to the high flowing velocity at the interior of the duct. Several correlations were used for the two-phase flow properties calculation which will make the simulations results more accurate.

### Introdução

O coqueamento retardado é um processo de craqueamento térmico não catalítico de hidrocarbonetos, sendo a sua principal aplicação a obtenção de combustíveis leves a partir de frações pesadas de petróleo (em geral, o resíduo de destilação a vácuo). A Unidade de Coqueamento Retardado (UCR) é constituída basicamente pelos seguintes equipamentos: fornalha, tambor e coluna fracionadora (SKZLO, 2005).

O processo de coqueamento retardado é um dos processos térmicos mais bem sucedidos dentre os processos de refino, devido ao fato deste processo não sofrer influências de contaminantes, tais como metais pesados e componentes sulfurosos. Assim, o processo torna-se ainda mais relevante quando observamos o panorama mundial, onde a qualidade do petróleo disponível tende a piorar devido a necessidade de exploração comercial de reservas com óleo pesado, contaminados por metais e com elevado teor de enxofre (VALYAVIN *et al.*, 2007).

Dentre os equipamentos que constituem a UCR, a fornalha se destaca por ser o equipamento responsável por fornecer o calor necessário para que ocorra a reação de craqueamento térmico das moléculas de hidrocarbonetos (ELLIS & PAUL, 1998). Estas reações ocorrem através de um mecanismo de reações em cadeia via radicais livres associados a um mecanismo de polimerização das olefinas. Sendo este último capaz de justificar a formação de coque durante o processo (SUGAYA, 1994).

O presente trabalho teve como objetivos a realização da modelagem matemática e da simulação de uma fornalha de coqueamento retardado. Para que tais objetivos fossem alcançados realizou-se, primeiramente, uma modelagem matemática que fez uso de equações diferenciais para representar o processo através de uma abordagem utilizando pseudo-componentes e *lumps*, onde esses últimos caracterizam sob o ponto de vista reacional as faixas de corte do resíduo de vácuo. Atualmente, o código computacional está sendo implementado em Fortran.

### Metodologia

No presente trabalho foi realizada a modelagem matemática para uma fornalha de uma unidade de coqueamento retardado, partindo dos balanços de massa e de energia baseados nos modelos para fornalhas de craqueamento térmico desenvolvidos por SUGAYA (1994),

HEYNDERICKX & FROMENT (1996) e MASOUMI *et al.*(2006). Assim, os resultados foram obtidos sob a forma de Equações Diferenciais Parciais que modelam o comportamento dinâmico do sistema estudado.

Na modelagem considerou-se um perfil de velocidade do tipo *Plug Flow*, fato este justificado pela elevada velocidade de escoamento que é necessária para o funcionamento adequado do forno. As Equações (1) e (2) foram utilizadas pelo SUGAYA (1994) para modelar a fornalha de craqueamento térmico, que serviram como base para o desenvolvimento do presente trabalho.

$$\frac{dC_{350}}{dx} = -\frac{KC_{350}A_T(h_l\rho_l + h_v\rho_v)}{G_T} \quad (1)$$

$$(G_l C_{p,l} + G_v C_{p,v}) \frac{dT}{dx} = -KC_{350}A_T h_l \Delta H + \pi D U_{TP} (T_w - T) \quad (2)$$

O modelo cinético considera uma cinética de primeira ordem e com 16 *lumps*, que contém gases, nafta, gasóleo e resíduo. Este modelo inclui 10 gases e 14 cortes contidos na faixa que vai de 75°C a 550+°C. Apesar dos mecanismos envolvidos no processo de craqueamento térmico envolverem reações em cadeia e poli-condensação de olefinas. Nas equações (3) a (12) tem-se o esquema dos *lumps* utilizados por SUGAYA (1994).

$$\frac{dC_{feed}}{dt} = -KC_{feed} \quad (4)$$

$$C_{products} = 1 - C_{feed} \quad (5)$$

$$C_{feed} = C_{gasoil} + C_{residue} \quad (6)$$

$$C_{products} = C_{gases} + C_{naphta} + C_{diesel} \quad (7)$$

$$C_{gases} = C_{H_2} + C_{H_2S} + C_{C1} + C_{C2=} + C_{C2} + C_{C3=} + C_{C3} + C_{C4=} + C_{iC4} + C_{nC4} \quad (8)$$

$$C_{naphta} = C_{5-75} + C_{75-125} + C_{125-150} + C_{150-185} + C_{185-204} \quad (9)$$

$$C_{Diesel} = C_{204-250} + C_{250-300} + C_{300-350} \quad (10)$$

$$C_{gas oil} = C_{350-400} + C_{400-450} + C_{450-475} + C_{475-500} + C_{500-550} \quad (11)$$

$$C_{residue} = C_{500+} \quad (12)$$

As equações para o cálculo das propriedades de mistura envolvidas na resolução do modelo podem ser encontradas nos trabalho de MATEUS (2008). Sendo utilizadas as equações de SOAVE (1972) para os cálculos de equilíbrio de fases.

## Resultados e Discussão

A partir dos modelos estacionários desenvolvidos por SUGAYA (1994) e MATEUS (2004), foi proposto um novo modelo dinâmico para a fornalha de craqueamento, sendo este modelo apresentado nas Equações (13) e (14), estas descrevem os balanços de massa e energia do processo estudado. Entretanto, a implementação do código computacional para resolução numérica do modelo encontra-se em andamento.

Balanço de massa:

$$(\rho_v G_v + \rho_l G_l) \frac{\partial C_{350}}{\partial t} = \frac{G_T^2}{A_T} \frac{\partial C_{350}}{\partial x} + KC_{350} G_T (\rho_l h_l + \rho_v h_v) \quad (13)$$

Analisando os termos da Equação (13), tem-se que o termo do lado esquerdo da equação corresponde ao acúmulo, o primeiro termo do lado direito da igualdade corresponde ao transporte convectivo e o segundo termo a taxa de reação.

Balanço de energia:

$$A_T (\rho_l C_{p,l} + \rho_v C_{p,v}) \frac{\partial T}{\partial t} = (G_l C_{p,l} + G_v C_{p,v}) \frac{\partial T}{\partial x} + KC_{350} A_T h_l \Delta H - \pi D U_{TP} (T_w - T) \quad (14)$$

Na Equação (14) temos o primeiro termo do lado esquerdo correspondendo ao acúmulo de energia, o primeiro termo do lado direito da equação corresponde à energia transportada por convecção, o segundo a energia gerada pela reação e o último termo corresponde à variação da energia interna do sistema.

Para o cálculo das constantes cinéticas foram usados os modelos cinéticos desenvolvidos por SUGAYA (1994) a partir dos dados obtidos por BRIA & FILGUEIRAS (1982), onde as conversões são determinadas pelas características das cargas tais como RCC e  $R_{350}$ .

A solução para estas equações está sendo implementada de forma numérica através do método das linhas. Esta técnica consiste em discretizar as equações parciais no espaço utilizando para tal o método das diferenças finitas. Desta forma, obtêm-se um sistema de equações diferenciais ordinárias que será resolvido usando um algoritmo de Runge-Kutta.

## Conclusões

O desenvolvimento do trabalho permitiu a obtenção de uma nova modelagem dinâmica para a fornalha de craqueamento térmico, sendo esta abordagem diferente das demais desenvolvidas por MATEUS (2008) e SUGAYA (1994). Tal abordagem permitirá posteriormente a implementação do modelo em estratégias de controle avançado. Atualmente, a implementação do modelo matemático encontra-se em andamento, e os resultados da simulação dinâmica 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                                                       |
| $C_i$                    | Concentração Mássica do componente i                                             |
| $C_{350}$                | Concentração mássica dos componentes com temperatura de ebulição abaixo de 350°C |
| D                        | Diâmetro da Fornalha                                                             |
| $G_T$                    | Vazão mássica total                                                              |
| $G_v$                    | Vazão mássica da fase vapor                                                      |
| $G_L$                    | Vazão mássica da fase líquida                                                    |
| H                        | Entalpia                                                                         |
| $h_l$                    | Hold up do líquido                                                               |
| $h_v$                    | Hold up da fase gasosa                                                           |
| $R_{350}$                | Fração mássica dos componente com temperatura de ebulição superior a 350°C       |
| T                        | Temperatura                                                                      |
| $T_w$                    | Temperatura da parede dos dutos                                                  |
| U                        | Energia interna                                                                  |
| Letras do Alfabeto Grego |                                                                                  |
| $\rho_l$                 | Densidade do líquido                                                             |
| $\rho_v$                 | Densidade do vapor                                                               |
| $\pi$                    | Número irracional                                                                |

## Referências Bibliográficas

ELLIS, P.J., PAUL,C.A.. **Tutorial: Delayed Coking Fundamentals** AIChE 1998 Spring National Meeting, New Orleans, LA, March 8-12,1998.

FABIAN, A.D.M., WOLF MACIEL, M.R.M SUGAYA M.F., MACIEL FILHO, R., COSTA, C B..B.. **Furnace Modeling and Simulation of Heavy Oil Thermal Cracking**. XVII Congresso Brasileiro de Engenharia Química, 2008.

HEYNDERICKX, G.J., FROMENT, G.F.. **Pyrolysis Furnace with Reactor Tubes of Elliptical Cross Section**. Industrial & Engineering Chemistry Research 35(7) p.2183-2189, 1996.

MASOUMI, M., SHAHROUKHI, M., SANDRAMELI, M., TOFIGHI, J.. **Modeling and control of a Naphta thermal cracking pilot plant.** Industrial & Engineering Chemistry Research 45. p. 3574-3582, 2006.

MATEUS, F.A.D. **Desenvolvimento de um modelo computacional para o craqueamento térmico.** Dissertação de Mestrado Unicamp – Campinas 2008.

SKZLO, A.S.. **Fundamentos do Refino de Petróleo** - Rio de Janeiro: Editora Interciência, 2005.

Soave, G.. **Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state.** Chemical engineering Science, 27. p. 1197, 1972.

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

VALYAVIN, G.G., E.A., KHUKHRIN, K.G. VALYAVIN.. **The place of delayed coking in modern oil refineries.** Chemistry and Technology of Fuels and Oils, 43, N° 3, 191-196, 2007.