

9º CONGRESSO BRASILEIRO DE PESQUISA E DESENVOLVIMENTO EM PETRÓLEO E GÁS



9º CONGRESSO
Brasileiro de **P&D** em
PETRÓLEO E GÁS

Maceió, AL
de 09 a 11 de novembro
2017

Realização:



ABPG
ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE P&D EM
PETRÓLEO E GÁS



TÍTULO DO TRABALHO:

Simulação da produção de xilenos utilizando o software HYSYS

AUTORES:

Tiago da Silva Moreira, Marina Fontes da Cunha Sousa Ota, Jean Marcel Prazeres Silva, Maurício Oliveira Alves, José Milton de Oliveira Junior, Regina Ferreira Vianna

INSTITUIÇÃO:

Universidade Federal da Bahia

SIMULAÇÃO DA PRODUÇÃO DE XILENOS UTILIZANDO O SOFTWARE HYSYS

Abstract

The dependence of the world economy on fossil energy sources, especially oil, in the face of questions about the way industrial activities impact the environment, requires the E&P sector to develop new forms of production and processing. Petroleum has as one of its main by-products the naphtha, which is the raw material for basic petrochemicals, olefins and aromatics. Aromatic compounds have great applicability in the petrochemical chain and significant commercial value. Among the aromatic compounds, the benzene, toluene and xylene (BTX) isomers are outstanding, with xylene having the highest commercial value. It constitutes the raw material for manufacturing plastic and synthetic fibers, in addition to being used as solvent. That is why there is a tendency to maximize its production over that of benzene and toluene. The process of xylene production takes place through the catalytic reform. Based on this production process, this work aims to simulate and optimize the process of xylenes production using a process simulator of great applicability in the industrial sector. A production process involving a conversion reactor, a heat exchanger and two distillation towers was simulated. As a thermodynamic model, the Soave-Redlich-Kwong (SRK) state equation was used. Sensitivity results from BTX feed loading are presented and analyzed for the influence of the final composition of xylene.

Introdução

A indústria petroquímica transforma subprodutos de petróleo ou gás natural em bens industriais. São organizadas em três diferentes setores, cada uma caracterizada pelo estágio de transformação de sua matéria-prima. São elas: empresas de primeira geração, empresas de segunda geração e empresas de terceira geração (BRASKEM, 2016).

A reforma catalítica é um importante processo industrial utilizado pelas empresas de primeira geração. Ela visa tanto à produção de combustíveis de alta qualidade (através do aumento de sua octanagem), a partir de cargas de nafta pesada, quanto à produção de compostos aromáticos (benzeno, tolueno e xileno – BTX). A operação poderá ser conduzida no sentido de produção de gasolina, como também para a produção de aromáticos, desde que sejam selecionadas cargas de naftas apropriadas, ajustadas devidamente as condições de operação e o sistema de recuperação adequado (Ribeiro, 2005).

Dentre os BTX's produzidos pela reforma catalítica ou por craqueamento, os xilenos são os de maior valor comercial. São constituídos por isômeros (o-, m- e p-xileno) e obtidos juntamente com outros aromáticos, como C_6 , C_7 e C_8 e separados por processos de extração-destilação e isomerização (Matar e Hatch, 1994). Eles constituem a matéria-prima empregada pelas empresas de segunda e terceira geração na fabricação de produtos químicos, plástico e fibras sintéticas, além de serem usados como solventes. Aproximadamente, 65% dos xilenos isolados são utilizados na produção de produtos químicos, como o ácido tereftálico, anidrido ftálico, ácido isoftálico, entre outros (Matar e Hatch, 1994). Por isso, existe uma maior tendência em sua maximização.

A aplicação dos conceitos, métodos e ferramentas de modelagem e simulação de processos é de fundamental importância para uma avaliação de viabilidade técnico-econômica dos processos produtivos, bem como para a identificação, análise e quantificação das condições operacionais que permitam definir condições de parada e partida, além de possíveis cenários de riscos.

Uma das principais vantagens da aplicação da modelagem e simulação de processos é o fato de uma vez que viabiliza a descrição do processo produtivo através de modelos matemáticos com um nível de confiança mensurável, permitir a modificação dos parâmetros de entrada e avaliação dos parâmetros de saída a um custo muito baixo, comparado aos investimentos para construção de plantas-piloto e/ou teste em sistemas reais.

Metodologia

O estudo foi desenvolvido em um fluxograma simplificado da produção de xileno, conforme Figura 1 e seus dados foram retirados da literatura, como mostra a Tabela 1. O reator do processo foi desenvolvido com o intuito de receber somente carga de benzeno e tolueno e o modelo termodinâmico utilizado no processo de destilação foi o Soave-Redlich-Kwong (SRK).

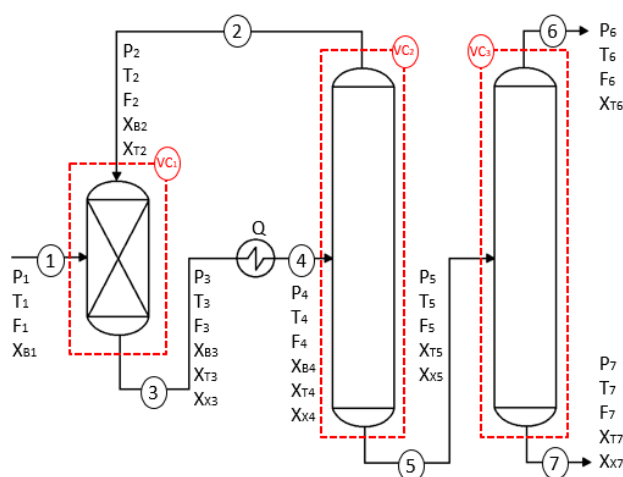


Figura 1- Fluxograma simplificado do processo utilizado para a produção de xileno.

Tabela 1 – Dados de entrada do processo.

Variáveis de entrada	Valor
T3	175 °F
T4	185 °F
X_{X3}	0,1
X_{T3}	0,4
X_{B3}	0,5

Fonte: Himmelblau, 2006.

A literatura (Himmelblau, 2006) somente aborda o processo a partir da alimentação da primeira torre de destilação, para que obtivéssemos os dados de alimentação, o reator funcionou como uma caixa preta e suas condições operacionais não puderam ser alteradas durante a simulação.

Para a realização da simulação, algumas premissas tiveram que ser estabelecidas:

- Considerados apenas os componentes: benzeno, tolueno e xileno;
- O reator é ideal e suas variáveis não poderão ser alteradas, portanto, o VC1 não será considerado no cálculo do grau de liberdade;
- Não foi considerada a cinética do reator na simulação;

- A pressão do sistema se mantém inalterada, ou seja, $P_1=P_2=P_3=P_4=P_5=P_6=P_7$;
- Há uma corrente pura no sistema do grau de liberdade: corrente 6 de saída da 2ª Torre, contendo somente tolueno;
- As vazões mássicas, pressões e frações mássicas das correntes 3 e 4 são as mesmas, somente as temperaturas T_3 e T_4 são diferentes devido ao trocador de calor.
- A corrente de refluxo da 1ª torre de destilação (2) é fixada para simulação;

Resultados e Discussão

O pacote computacional comercial HYSYS, versão 2.2, foi utilizado para a realização das simulações em um computador com configuração básica de processador de 2 núcleos de 2,30 GHz da Intel (i5) e memória RAM de 4 Gb.

No processo de validação do modelo, a vazão de entrada encontrada, ou seja, a vazão com a qual é possível uma separação de 99% de xileno foi de 2.000 kg/h. O fluxograma desenvolvido no programa pode ser observado na Figura 2.

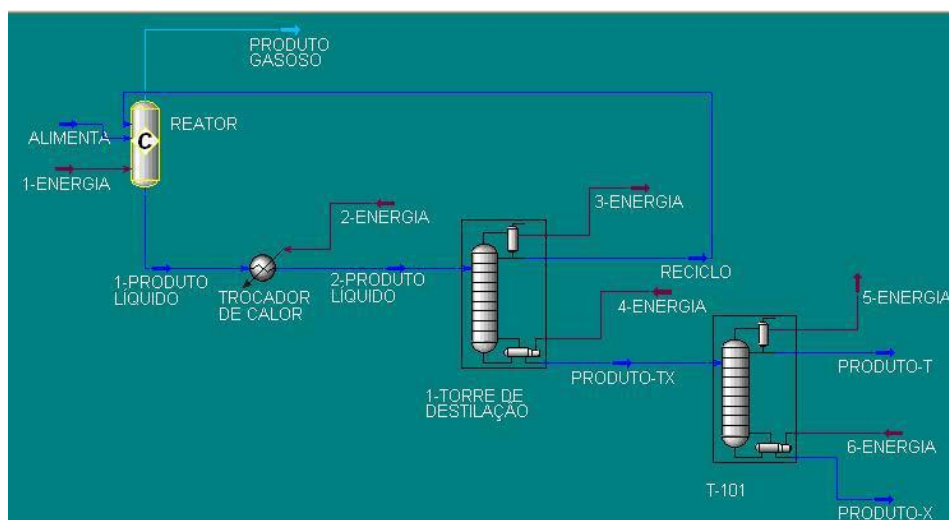


Figura 2 - Layout do HYSYS do fluxograma do processo de produção de xileno.

Como o grau de liberdade do sistema resultou em 1, foi necessário definirmos valor de uma variável de entrada para que o sistema tivesse uma única solução. Foi realizada simulações variando a vazão de saída do reator 1 (F3) e a temperatura de saída do trocador de calor (T4), afim de verificarmos suas influências na conversão do xileno.

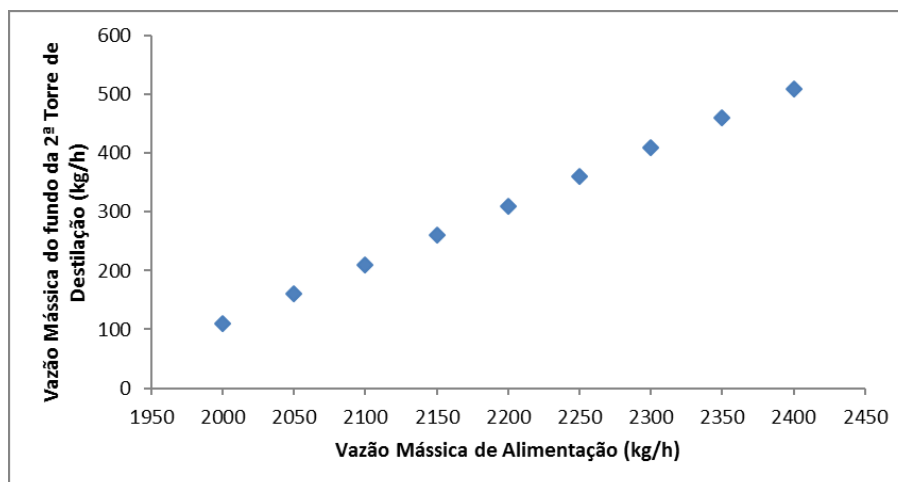


Figura 3 - Gráfico da influência da vazão mássica de alimentação na vazão de produção de xileno.

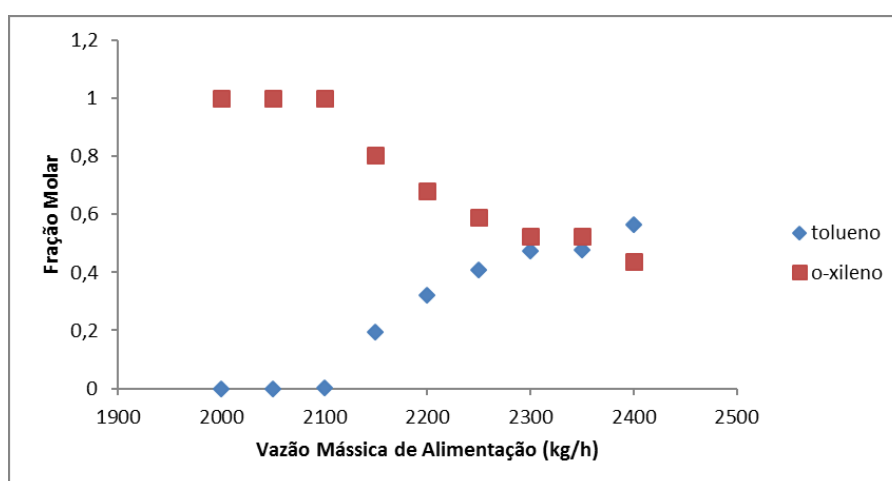


Figura 4 - Gráfico da influência da vazão mássica de alimentação na fração de xileno produzido.

A influência do aumento da vazão de alimentação da 1ª torre ocorre de forma linear, tal como representado no gráfico da figura 3. No entanto, ao avaliar a influência do aumento da alimentação sobre a composição do produto de fundo da segunda coluna, conforme representado no gráfico da figura 4, observou-se que a partir de 2100 kg/h ocorreu perda de especificação (fração molar do produto menor que a desejada para xileno) chegando a um valor estável, em torno de 50%, para alimentação a partir de 2300 kg/h.

Essa perda de especificação não é a condição de operação desejada para o processo. Para tentar explicar o motivo desse desvio da condição de operação esperada, deve-se complementar a análise incluindo a observação do comportamento da vazão e da composição de topo da 2ª torre, conforme figuras 5 e 6.

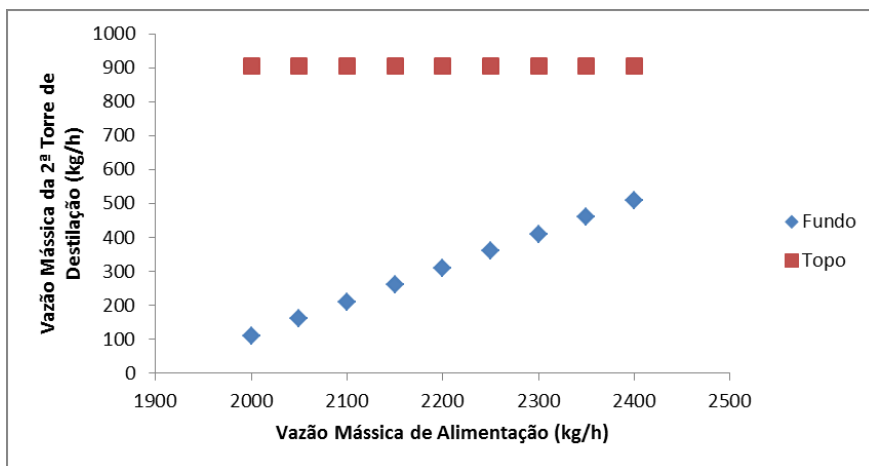


Figura 5 - Gráfico da influência da vazão de alimentação nas vazões de topo e fundo da 2ª Torre.

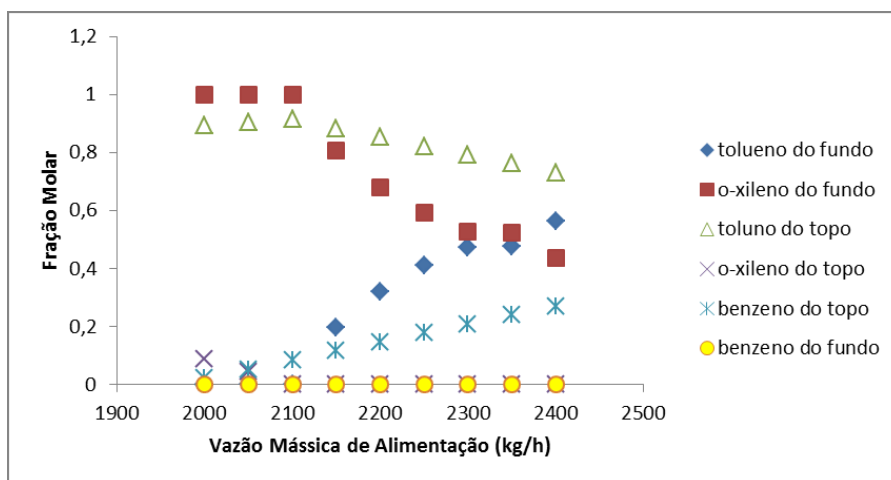


Figura 6 - Gráfico da influência da vazão de alimentação nas composições de topo e fundo da 2ª Torre.

Como é possível observar no gráfico da figura 5, o aumento da vazão de alimentação resulta no aumento da vazão de fundo da 2ª coluna, mas a vazão de topo permanece constante. De forma genérica, o comportamento das curvas das vazões de topo e fundo da 2ª coluna será coerente quando forem analisados sob a perspectiva dos conceitos de balanço global de massa neste volume de controle. O aumento da vazão mássica de fundo se deve à vazão mássica acrescida na vazão de alimentação e, que por algum motivo, não está aumentando a quantidade que será separada e removida no topo.

A confirmação de que o aumento da vazão de fundo da 2ª coluna se deve à parte da carga alimentada que foi separada e removida no topo é possível com a análise do gráfico da Figura 8. A Inclinação da reta que representa a vazão de fundo (Figura 5) é similar à inclinação da reta que representa a composição do tolueno no fundo da coluna.

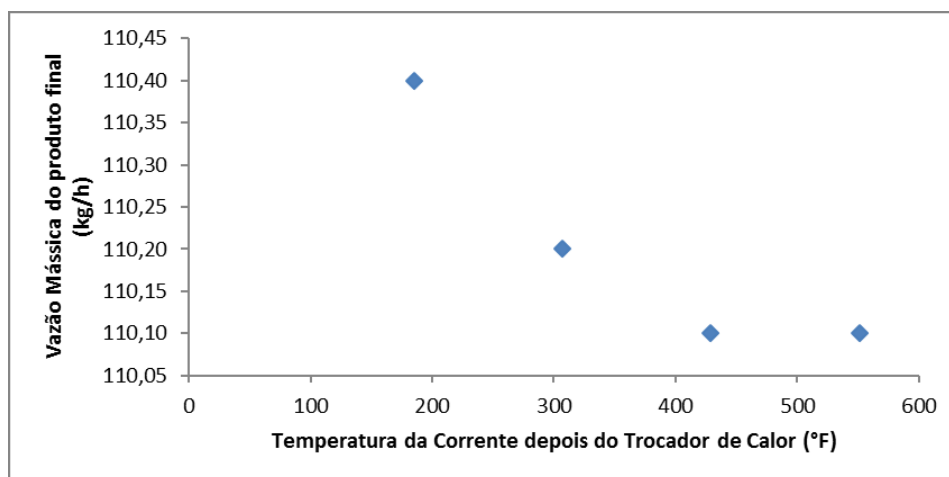


Figura 7 - Gráfico da influência da temperatura de entrada na 1ª Torre na vazão de produção de xileno.

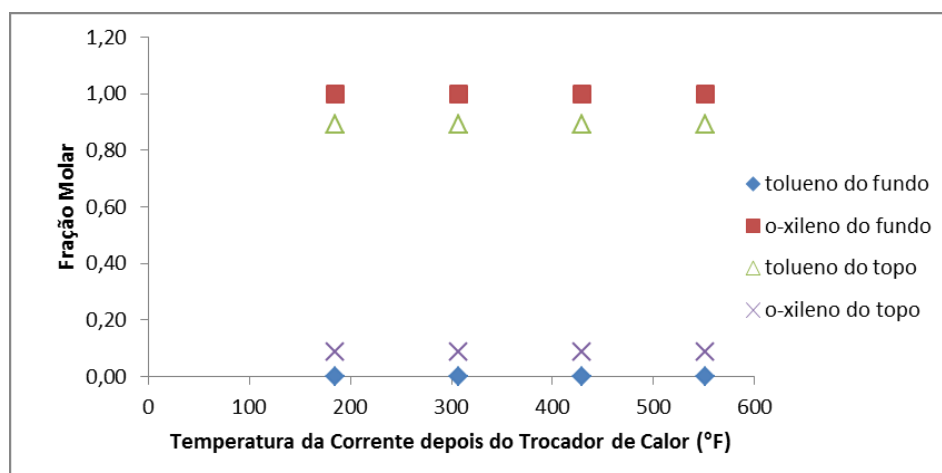


Figura 8 - Gráfico da influência da temperatura de entrada nas composições de topo e fundo da 2ª Torre.

Analisando o comportamento da segunda torre frente à variação da temperatura de alimentação da primeira torre, os resultados observados indicaram, de uma forma geral, que uma grande variação de temperatura não resultou em aumento significativo na eficiência de separação e qualidade dos produtos de topo e fundo. Os gráficos representados nas Figuras 7 e 8 demonstram que há uma limitação do processo quanto ao aumento de carga térmica do mesmo.

Conclusões

Após o desenvolvimento do modelo e validação dos resultados, comparando-os com dados disponíveis na literatura utilizada e dos testes de sensibilidade para avaliar o comportamento do processo, foi possível perceber que o modelo utilizado apresenta resultados que aderem às tendências balizadas nos conceitos teóricos inerentes às transformações previstas no processo.

Em relação à variação de temperatura, a análise de sensibilidade tem uma particularidade. Apesar de apresentar consistência com o modelo desenvolvido, estes resultados demonstram que há limitações no modelo quanto a sua capacidade de predição dos efeitos relacionados ao aumento de carga térmica, devido à restrição física do equipamento utilizado na troca térmica, deixando de ser eficiente. Isso se dá por não atender às condições de projeto. Assim sendo, seria necessário iniciar uma análise adicional para avaliação de estrutura física dos equipamentos utilizados no processo e redefinir as especificações do projeto.

Referências Bibliográficas

BRASKEM. O Setor Petroquímico. Disponível em:
<<http://www.braskem.com.br/cms/RI/Compartilhar/Pdf?titulo=o-setor-petroquimico&url=pXO82E6OuVTBfQr/94pCo2mOTgPZ+250ymY9BCVzFnJmdnhi61uoaa1y7KVIuVcGmWW/XBkc8cM>>. Acesso: 02/10/2016

HIMMELBLAU, D. M, RIGGS, J. B. Engenharia Química – Princípios e Cálculos, Editora LTC, 7ª Edição, Rio de Janeiro, 2006.

MATAR, S.; HATCH, L. F. Chemistry of Petrochemical Processes. Gulf Publishing Company, Houston, Texas. 1994.

RIBEIRO, O. M. S., 2005. Desenvolvimento de um Modelo Cinético para a Reforma Catalítica do N-octano sobre o Catalisador Pt/L. Departamento de Engenharia Química, Campina Grande, PB, 2005.