Universidade Estadual de Campinas

Faculdade de Engenharia Química

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

LABORATÓRIO DE DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS DE SEPARAÇÃO (LDPS)

SIMULAÇÃO E ANÁLISE DA COLUNA DE DESTILAÇÃO A VÁCUO DA UNIDADE DE DESTILAÇÃO DE PROCESSOS DE REFINO DE PETRÓLEO

Autor: Júlio Pereira Maia

Orientadora: Prof^a Dra. Maria Regina Wolf Maciel

Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Química como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Campinas - São Paulo

Fevereiro,2007

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA E ARQUITETURA - BAE -UNICAMP

M28s	Maia, Júlio Pereira Simulação e análise da coluna de destilação a vácuo da unidade de destilação de processos de refino de petróleo / Júlio Pereira MaiaCampinas, SP: [s.n.], 2007.
	Orientador: Maria Regina Wolf Maciel. Dissertação de Mestrado - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.
	1. Petróleo. 2. Vacuo - Tecnologia. 3. Petroleo refinação. 4. Destilação. I. Maciel, Maria Regina Wolf. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Título em Inglês: Simulation and analysis of vacuum distillation column from distillation unit of petroleum refinery processes Palavras-chave em Inglês: Petroleum, Vacuum - Technology, Petroleum refining, Distillation Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos Titulação: Mestre em Engenharia Química Banca examinadora: Reginaldo Guirardello, Basilino Barbosa de Freitas Junior Data da defesa: 16/02/07 Programa de Pós Graduação: Engenharia química Dissertação de Mestrado defendida por Júlio Pereira Maia em 16 de fevereiro de 2007 pela banca examinadora constituída pelos doutores:

Profª Drª Maria Regina Wolf Maciel

lella

Prof. Dr. Reginaldo Guirardello

Dr. Basilino Barbosa de Freitas Junior

Este exemplar corresponde à versão final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química.

pue

Prof. Dra. Maria Regina Wolf Maciel (Orientadora)

AGRADECIMENTOS

À minha família, por todos os dias;

À minha orientadora Maria Regina pelo apoio nas horas em que mais precisei.

Ao Prof. Rubens, pelas contribuições neste trabalho;

Ao Engenheiro Magno Schiavolin pela ajuda e visita técnica na Refinaria de Paulínia (REPLAN).

A todos os que estiveram comigo nesta caminhada; aos meus queridos colegas de LDPS/LOPCA e aos técnicos Cristiano e Elton Roberto;

À Capes, pelo apoio financeiro necessário para a conclusão deste trabalho.

"Heavy Crude distillation is a black art" Watkins, R.N.

RESUMO

Unidades de vácuo para destilação de petróleo são estudadas neste trabalho. A destilação a vácuo é empregada para frações pesadas do petróleo, com vastas aplicações em processamento de crus pesados e ultra-pesados, motivado pelas dificuldades em se processar estes crus a pressão atmosférica devido ao alto ponto de ebulição dos componentes em suas composições. Estes compostos podem ser facilmente decompostos se não forem destilados abaixo da pressão atmosférica. Os produtos obtidos desta unidade são usados como insumos para a Unidade de Craqueamento Catalítico (UCC). Adotaram-se dois tipos de crus neste trabalho. Estes crus foram estabelecidos e caracterizados em um ambiente de simulação. Diferentes blends dos óleos foram considerados. Como unidades de vácuo estão conectadas com unidades atmosféricas, ambas as unidades foram simuladas no estado estacionário. A unidade atmosférica foi simulada com os equipamentos auxiliares principais. Produtos da unidade atmosférica foram determinados, e procedimentos para ajustar as variáveis de sistema de forma a fazer com que os produtos estivessem especificados foram apresentados. O projeto convencional de unidade de vácuo para produção de combustíveis foi o adotado para a simulação. Procedimentos para auxiliar a convergência da simulação desta unidade foram desenvolvidos. Uma análise de sensitividade foi conduzida, analisando as principais variáveis do sistema. Baseado nisso, um procedimento de otimização no estado estacionário foi adotado, levando em consideração os limites de convergência determinados para a análise de sensitividade. O sistema foi convertido do estado estacionário para se realizar uma simulação dinâmica. A simulação dinâmica foi conduzida com mudanças no fluxo de alimentação da torre atmosférica. O estabelecimento desta plataforma de simulação e sua disponibilidade foram muito importantes, bem como os resultados da simulação, por não ser facilmente encontrado na literatura aberta. Mais ainda, a grande complexidade deste processo de separação faz com que seja útil para treinamento de operadores.

vii

ABSTRACT

Vacuum units for petroleum distillation are studied in this work. Vacuum distillation is employed for heavy petroleum fractions, with large applications on heavy and ultra-heavy crude processing, motivated by difficulties in processing these crudes at atmospheric pressure, due to the boiling range of the compounds in their compositions. These compounds would be easily decomposed if they were not distillated under atmospheric pressure. The products obtained from this unit are used as feedstock for Fluid Catalytic Cracking Unit (FCCU). Two different petroleum crudes were adopted in this work. These petroleum were established and characterized in a simulation environment. Different blends from the oils were considered. As vacuum units in petroleum plants are connected with atmospheric units, both units were simulated in steady state. The atmospheric unit was simulated with the main auxiliary equipment. Products from atmospheric unit were set, and a procedure to set system variables in order to make the products to meet specifications was presented. The conventional design vacuum unit for fuels production was set to be simulated. Procedures to aim convergence of the simulation of this unit were developed. A sensitivity analysis was carried out, analyzing the main variables of the system. Based on it, an optimization procedure in steady state was applied, taking into consideration the convergence bounds set for the sensitivity analysis. The system was converted from steady state to perform a dynamic simulation. The dynamic simulation was carried out with changes in the atmospheric feed flow rate. The establishment of this simulation platform and its availability were very important as well as the results of the simulation, since this is not easily found in the open literature. Moreover, the large complexity of this separation process makes it useful for operator training.

SUMÁRIO

1. Introdução e Objetivos	1
1.1. Estrutura da dissertação.	3
2. Petróleo – métodos de caracterização e representação de componentes	5
2.1. O petróleo	5
2.1.1. Aspectos do petróleo	6
2.1.2 Caracterização	8
2.1.3. Métodos de destilação	10
2.1.4. Métodos de destilação em batelada	10
2.1.5. Destilação para o cálculo de curva de ponto de ebulição verdadeiro	13
2.1.6. Curva de vaporização de equilíbrio (EFV)	13
2.1.7. Seleção e cálculo de propriedades de pseudocomponentes	13
2.1.7.1. Pontos de Ebulição Médios	13
2.1.7.2. Comportamento de fase de misturas não definidas	15
2.1.7.3. Pseudocomponentes	15
2.1.7.4. Estimativa das propriedades críticas	15
2.2. Implementação de curvas de caracterização de petróleos em ambiente de simulação.	18
2.2.1. Tipos de Petróleo considerados neste trabalho.	18
2.3. Resultados da implementação.	20
2.4. Conclusões	25
3. Destilação Atmosférica.	26

3.1. Destilação Atmosférica – Descrição do processo.	26
3.2. Implementação da simulação da coluna atmosférica.	28
3.2.1. Cálculo de propriedades	28
3.2.2. Configurações adotadas	32
3.3. Resultados - coluna atmosférica.	36
3.3.1. Resultados da adequação do sistema às especificações de produto.	38
3.3.2. Resultados sem reciclos circulantes.	40
3.3.3. Implantação e resultados com reciclos circulantes.	41
3.4. Conclusão	47
4. Destilação a Vácuo	49
4.1. Destilação a Vácuo – Descrição do processo.	49
4.1.1. Revisão da literatura	52
4.2. Implementação da simulação da coluna a vácuo.	55
4.3. Inserção dos estágios da coluna a vácuo.	58
4.4. Considerações a respeito dos resultados para coluna atmosférica.	60
4.5. Resultados da simulação da coluna a vácuo	63
4.6. Conclusões	67
5. Otimização da coluna de destilação a vácuo.	69
5.1. Configurações de alimentação consideradas e situação ideal	69
5.2. Análise de sensitividade.	69
5.2.1. Análise sensitiva – Petróleo leve	73
5.2.2. Análise sensitiva – Petróleo pesado	78
5.3. Otimização da coluna a vácuo	84
5.4. Conclusão	89

6. Simulação dinâmica	
6.1. Procedimentos de estabelecimento de simulação dinâmica	91
6.2. Simulação dinâmica	94
6.3. Conclusões	100
7. Conclusões finais	102
8. Sugestões para trabalhos futuros	104

LISTA DE FIGURAS

Capítulo 2

Figura 2.1	Produtos de corte de petróleo (Altgelt, 1994)	9
Figura 2.2	Equipamento para levantamento de curva ASTM D1160	11
	(Gray, 1994)	
Figura 2.3	Relações entre curvas de caracterização (Gray, 1994)	14
Figura 2.4	Comparação métodos e opções de corte – Petróleo leve.	21
Figura 2.5	Comparação métodos e opções de corte – Petróleo pesado.	22
Figura 2.6	Comparação dos resultados da caracterização – Petróleo leve.	23
Figura 2.7	Comparação dos resultados da caracterização – Petróleo pesado.	23
Figura 2.8	Comparação entre PEV óleo Leve e Pseudocomponentes.	24
Figura 2.9	Comparação entre PEV pesado e pseudocomponentes.	24

Figura 3.1	Esquema de destilação atmosférica (sem reciclos circulantes)	26
Figura 3.2	Frações de produtos destilados – alimentação petróleo leve.	35
Figura 3.3	Frações de produtos destilados – alimentação com blend.	35
Figura 3.4	Frações de produtos destilados – alimentação com petróleo pesado.	36
Figura 3.5	Situação inicial de configuração, petróleo leve.	37
Figura 3.6	Situação inicial de configuração, petróleo pesado.	37
Figura 3.7	Esquema de destilação atmosférica (com reciclos circulantes)	41
Figura 3.8	Perfil de temperatura (com reciclos circulantes) – Petróleo leve.	46

Figura 3.9 Perfil de temperatura (com reciclos circulantes) – Petróleo 47 pesado.

Capítulo 4

Figura 4.1	Descrição do processo de destilação a vácuo (Golden, 1994).	50
Figura 4.2	Configuração simplificada de destilação a vácuo.	55
Figura 4.3	Coluna de destilação a vácuo – ambiente de simulação.	57
Figura 4.4	Instalação do primeiro estágio – coluna a vácuo.	59
Figura 4.5	Instalação do segundo estágio – coluna a vácuo.	60
Figura 4.6	Distribuição de produtos – resíduo atmosférico – petróleo leve.	62
Figura 4.7	Distribuição de produtos – resíduo atmosférico – blend petróleo.	62
Figura 4.8	Distribuição de produtos – resíduo atmosférico – petróleo pesado.	63
Figura 4.9	Simulação inicial – Petróleo leve.	66
Figura 4.10	Simulação inicial – Petróleo pesado.	67

Figura 5.1	Sistema de coluna de destilação a vácuo considerado na análise sensitiva.	71
Figura 5.2	1° estágio – perfis de temperatura e fluxos de vapor e líquido.	72
Figuras 5.3 e 5.4	Comportamento dos produtos GORT e GOL com variação do fluxo de vapor.	73
Figuras 5.5 e 5.6	Comportamento dos produtos GOP e GOL+GOP com variação do fluxo de vapor.	73

- Figuras 5.7 e 5.8 Comportamentos dos produtos GORT e GOL com 74 variação da temperatura de retorno do reciclo circulante (2° estágio).
- Figuras 5.9 e 5.10 Comportamentos dos produtos GOP e GOL+GOP com 75 variação da temperatura de retorno do reciclo circulante (2°estágio).
- Figuras 5.11 e 5.12 Comportamentos dos produtos GORT e GOL com 76 variação da razão de produto GOP e reciclo de líquido no 2°estágio pela válvula *spliter*.
- Figuras 5.13 e 5.14 Comportamentos dos produtos GOP e GOL+GOP com 77 variação da razão de produto GOP e reciclo de líquido no 2° estágio pela válvula *spliter*.
- Figuras 5.15 e 5.16 Comportamentos dos produtos GORT e GOL com 78 variação do fluxo de vapor.
- Figuras 5.17 e 5.18 Comportamentos dos produtos GOP e fluxo GOL+GOP 78 com variação do fluxo de vapor.
- Figuras 5.19 e 5.20 Comportamentos dos produtos GORT e GOL com 80 variação da razão de produto GOP e reciclo de líquido no 2° estágio pela válvula *spliter*.
- Figuras 5.21 e 5.22 Comportamentos dos produtos GOP e fluxos GOL+GOP 80 com variação da razão de produto GOP e reciclo de líquido no 2° estágio pela válvula *spliter*.
- Figuras 5.23 e 5.24 Comportamentos dos produtos GORT e GOL com 81 variação da temperatura de retorno de reciclo de líquido no 2° estágio.
- Figuras 5.25 e 5.26 Comportamentos dos produtos GOP e fluxos GOL+GOP 82 com variação da temperatura de retorno de reciclo de líquido no 2° estágio.

Figuras 5.27 e 5.28	Comportamentos dos produtos GOP e fluxos GOL+GOP 83
	com variação da temperatura de retorno de reciclo de
	líquido no 3° estágio.

Figuras 5.29 e 5.30 Comportamentos dos produtos GOP e fluxos GOL+GOP 83 com variação da temperatura de retorno de reciclo de líquido no 3° estágio.

Figura 5.31	Situação otimizada – petróleo leve.	88
Figura 5.32	Situação otimizada – petróleo pesado.	88

Figura 6.1	Sistema considerado para simulação dinâmica.	95
Figuras 6.2 e 6.3	Resposta a variação do sistema de destilação atmosférica	96
	(Fluxo de Resíduo atmosférico e temperatura ASTM D86	
	95%).	

- Figuras 6.4 e 6.5Resposta a variação do sistema destilação a vácuo em 96malha aberta (ASTM D86 95% e fluxo RV).
- Figuras 6.6 e 6.7Resposta a variação do sistema destilação a vácuo em 97malha aberta (ASTM D86 95% e fluxo GOP).
- Figuras 6.8 e 6.9 Resposta a variação do sistema destilação a vácuo em 98 malha aberta (ASTM D86 95% e fluxo GOP).
- Figura 6.10Resposta a variação no sistema de destilação a vácuo em 99malha aberta (ASTM D86 95% e fluxo GOP).
- Figura 6.11 Perfil da simulação dinâmica para o produto GORT. 99
- Figura 6.12 Perfil da simulação dinâmica para o vapor na entrada do 100 3° estágio.
- Figura 6.13 Perfil da simulação dinâmica para o vapor na entrada do 100 2°estágio.

LISTA DE TABELAS

Capítulo 2

Tabela 2.1	Aspectos gereais e exemplos de frações típicas do petróleo.	7
Tabela 2.2	Especificação petróleo leve (°API 36).	18
Tabela 2.3	Especificação petróleo pesado (° API 20).	19
Tabela 2.4	Especificação dos blends considerados no trabalho.	19
Tabela 2.5	Critérios para corte na geração de pseudocomponentes.	21

Tabela 3.1	Métodos de cálculo de propriedades adotados. 29					
Tabela 3.2	Especificações de projeto. 3					
Tabela 3.3	Configurações operacionais iniciais – forno aquecimento. 3-					
Tabela 3.4	Configuração inicial dos fluxos de produto e vapor de esgotamento.					
Tabela 3.5	Especificações de produto para coluna atmosférica.	35				
Tabela 3.6	Resultados da adequação – caso petróleo leve. 38					
Tabela 3.7	Resultados adequação – caso <i>blend</i> petróleo. 39					
Tabela 3.8	Resultados adequação – caso petróleo pesado. 39					
Tabela 3.9	Comparação resultados (caso petróleo leve). 40					
Tabela 3.10	Resultados do sistema com reciclos circulantes – petróleo leve. 4.					
Tabela 3.11	Comparação entre cargas térmicas do sistema – petróleo leve. 43					
Tabela 3.12	Resultados do sistema com reciclos circulantes – <i>blend</i> petróleo. 44					
Tabela 3.13	Comparação entre cargas térmicas do sistema – <i>blend</i> petróleo. 44					
Tabela 3.14	Resultados do sistema com reciclos circulantes – petróleo pesado. 43					

Tabela 3.15Comparação entre cargas térmicas do sistema – petróleo pesado.45

Capítulo 4

Tabela 4.1	Especificações de produto.	61
Tabela 4.2	Comparação dos resultados – petróleo leve.	64
Tabela 4.3	Resultados da implementação – petróleo leve, <i>blend</i> , petróleo pesado.	65

Capítulo 5

Tabela 5.1	Limites de operação para variáveis de estudo.	70
Tabela 5.2	Procedimentos adotados para otimização – petróleo leve.	85
Tabela 5.3	Procedimentos adotados para otimização – petróleo pesado.	85
Tabela 5.4	Resultados otimização – petróleo leve.	86
Tabela 5.5	Resultados otimização – petróleo pesado.	87

Tabela 6.1	Parâmetros físicos usados na exportação – Coluna atmosférica.	92
Tabela 6.2	Parâmetros físicos usados na exportação – Colunas auxiliares.	92
Tabela 6.3	Parâmetros físicos usados na exportação – coluna a vácuo.	93

NOMENCLATURA

API	(American Petroleum Institute) – Grau API		
ASG_i	Peso específico <i>i</i> -ésimo componente;		
ASTM D86	Norma para destilação em pressão ambiente de frações de petróleo		
ASTM D1160	Norma para destilação em pressões sub-atmosféricas de frações de petróleo		
ASTM D2892	Método padrão para obtenção de uma curva de ponto de ebulição verdadeiro		
Blend	Mistura de dois ou mais tipos distintos de petróleo		
C_{1i}	Parâmetro do modelo WATSOL, para i-ésima espécie orgânica		
C_{2i}	Parâmetro do modelo WATSOL, para i-ésima espécie orgânica		
C_{3i}	Parâmetro do modelo WATSOL, para i-ésima espécie orgânica		
f_m	Fator equação 2.17		
f_P	Fator equação 2.16		
f_T	Fator equação 2.14		
f_V	Fator equação 2.15		
Gap 5-95	Diferença entre a temperatura de ebulição entre frações de dois compostos adjacentes, sendo a temperatura em que 5% do produto mais pesado é vaporizada e a temperatura em que 95% do produto mais leve é vaporizada		
H_m^{ig}	Entalpia de mistura para gás ideal (KJ/Kmol)		
H_m^l	Entalpia de mistura para líquido (KJ/Kmol)		
K _w	Fator de caracterização de Watson		
$K_{_{wt}}$	Coeficiente de partição da água na fase orgânica		

M_{i}	Fração molar <i>i</i> -ésimo componente.		
MABP	(<i>Molar Average Boiling Point</i>) – Ponto de ebulição em base molar (°C)		
MeABP	(<i>Mean Average Boiling Point</i>) –Ponto de ebulição em base da média dos pontos de ebulição médios (°C)		
MAPBP	(<i>Mean Average Pseudocomponent Boiling Point</i>) – Ponto de ebulição médio de pseudocomponente (°C)		
MW	(Molecular Weight) - Peso molecular (Da)		
Р	Pressão (psia)		
P_{C}	Pressão crítica pseudocomponente (psia)		
P_{C}^{o}	Pressão crítica composto n-alcano de referência (psia)		
PEV	Ponto de ebulição verdadeiro (°C)		
SG	Peso específico a 15°C ou peso específico de pseudocomponente.		
SG°	Peso específico composto n-alcano de referência relativo à água a 15°C		
Ta_i	Temperatura de fração de volume de amostra de petróleo (°C)		
T _b	Ponto de ebulição médio (°R)		
T_{bi}	Temperatura de ebulição <i>i</i> -ésimo componente;		
T_{C}	Temperatura crítica pseudocomponente (R)		
T_{C}°	Temperatura crítica composto n-alcano de referência (R)		
T _i	Temperatura ebulição do pseudocomponente <i>i</i>		
T_m	Temperatura ebulição medida no equipamento (°F)		
T _n	Ponto de ebulição normal (°F)		
$T_{n,atual}$	Ponto de ebulição médio para amostras com fator de caracterização de Watson menor do que 12 (°F)		

va_i	Fração volume de amostra de petróleo
V _C	Volume molar crítico pseudocomponente (pé3/lb-mol)
V _c °	Volume molar crítico composto n-alcano de referência (pé ³ /lb-mol)
V_m^l	Volume molar líquido para mistura (m³/kmol)
V_p^l	Volume molar líquido dos pseudocomponentes (m³/kmol)
V_r^l	Volume molar líquido componentes reais (m³/kmol)
v _i	Volume molar do pseudocomponente <i>i</i> (m ³ /kmol)
VABP	(Volume Average Boiling Point) –Ponto de ebulição em base de volume percentual (°C)
X _i	Fração molar livre de água na i-ésima espécie orgânica
X _{wt}	Fração de água na fase orgânica
x_{wt}^{sol}	Solubilidade limite da água na fase orgânica
x_{wi}^{vol}	Fração molar da solubilidade da água na i-ésima espécie orgânica
WABP	(Weight Average Boiling Point) –Ponto de ebulição em base mássica (°C)

Letras gregas

${\mathcal{Y}}_{wt}$	Coeficiente de atividade da água na fase orgânica
ΔSG_m	Fator equação 2.17
ΔSG_P	Fator equação 2.16
ΔSG_T	Fator equação 2.14
ΔSG_{V}	Fator equação 2.15
$arphi_{\scriptscriptstyle wt}^{*,l}$	Coeficiente de fugacidade da água pura, líquida usando o método para o cálculo da fase aquosa
φ^{v}_{wt}	Coeficiente da água na mistura da fase vapor, calculado pelo método de propriedades principal
ω	Fator acêntrico

SOBRESCRITOS

ig	Gás ideal
1	Líquido
*	Saturação
V	Vapor
sol	Solubilidade
0	Composto de referência (n-alcano) ou pressão de referência ou
	temperatura de referência.

SUBSCRITOS

В	Ebulição
bi	Ebulição i-ésimo componente
c	Crítico
i	i-ésimo componente
1i	Parâmetro equação 3.7a
2i	Parâmetro equação 3.7b
3i	Parâmetro equação 3.7c
m	Medida por equipamento ou propriedade de mistura
n	Normal
n,atual	Normal para amostras com K_W menor que 12.
р	Pseudocomponente
r	Real
Т	Temperatura
V	Volume
W	Watson ou água
wi	Água em espécie orgânica
wt	Água

Capítulo 1 - Introdução e Objetivos

O petróleo é uma matéria prima de grande valor, devido à gama de produtos que são produzidos através de seu fracionamento. Seu processamento, através das unidades de refino, passa por unidades de variados tipos, que podem, na maior parte delas, serem agrupadas em três grupos: unidades de separação, unidades de conversão, e unidades de polimento ou tratamento.

As unidades de separação, mais usualmente unidades de fracionamento, atuam por processos físicos, separando correntes de produtos desejados. As unidades de conversão, onde tem-se, por exemplo, as unidades de craqueamento, promovem mudanças do peso molecular e do ponto de ebulição dos produtos. As unidades de beneficiamento, tais como unidades de hidrotratamento, promovem modificações nos produtos a fim de atingir especificações de produtos. A unidade de refino – refinaria, como um todo, não possui um projeto único, mas sim vários projetos, que em geral respeitam aspectos físicos e químicos da matéria prima, aspectos comerciais e especificação de produtos demandados pelo mercado consumidor que esta refinaria se propõe a produzir.

De acordo com estas exigências, a característica da matéria prima e as demandas do mercado as unidades contarão com um maior ou menor número de unidades, quer sejam elas de transformação, de beneficiamento, ou de fracionamento. Mas, independente da matéria prima em questão, ou das demandas do mercado consumidor que a unidade se propõe a suprir, as unidades de fracionamento estão presentes em todas as refinarias, ocupando um papel de destaque, por serem praticamente o ponto de partida de todo o processo, separando as principais correntes de produto que alimentam o restante da unidade.

Especialmente no que tange a isso, a demanda de produtos do mercado consumidor muitas vezes esbarra nas limitações das características da matéria prima a ser processada. A quantidade de produtos produzidos a partir de um dado petróleo não é a mesma de outro petróleo, e se a demanda por um tipo de produto for maior do que o petróleo pode produzir, maior quantidade deste petróleo deve ser processado para suprir esta demanda. A crescente demanda por produtos leves e intermediários, e a crescente disponibilidade de petróleo com maior fração de produtos pesados, provoca uma busca no melhor aproveitamento das frações pesadas do petróleo.

Em geral, os produtos do petróleo são processados primeiramente em unidades de fracionamento. A primeira unidade de fracionamento separa as frações leves e intermediárias de onde seguem para outras unidades de conversão e beneficiamento. A fração pesada desta primeira unidade segue para outra unidade de fracionamento, onde este ocorre a baixas pressões, e é conhecida como unidade de destilação a vácuo.

A unidade de destilação a vácuo separa as frações pesadas do petróleo, segundo fins de produção e características do petróleo processado. Existem, basicamente, dois modelos básicos de configuração desta unidade, de acordo com o fim que se pretende dar a estas frações pesadas. A primeira delas é a configuração de base de lubrificantes e ceras, e a segunda configuração é a de produção de base de combustíveis. Na configuração de base de lubrificantes, mais correntes de produtos são exigidas, e um rigor maior na qualidade de separação é exigido. A configuração de base de combustíveis possui um número menor de correntes de produtos, e um menor rigor na qualidade de separação entre os produtos. Dos produtos separados na configuração de base de combustíveis, tem-se correntes que serão processadas dando origem a produtos, tais como óleo combustível, asfalto e coque de petróleo.

Como a demanda de mercado por combustíveis pede uma maior produtividade de frações leves e intermediárias do petróleo processado, os produtos desta unidade vêm sendo utilizados como matéria prima de outra unidade da refinaria, conhecida como unidade de craquamento catalítico, que promove a quebra por reações químicas destas correntes de frações pesadas da unidade de destilação a vácuo em compostos mais leves, aumentando a fração de produtos leves e intermediários do petróleo processado.

Com essa utilização dos produtos da unidade de destilação a vácuo, somada à demanda do mercado consumidor, e a custos inerentes a esta própria unidade, uma análise para uma melhor compreensão da unidade se faz necessária. Este trabalho se propõe a apresentar esta análise, partindo de um caso mais simples para outros tipos de configurações, com análise dos fluxos do processo, apresentando alternativas de configurações operacionais para otimização energética e melhoria no rendimento do processo.

Portanto, como objetivos específicos desta tese tem-se:

- Estabelecimento da coluna de destilação a vácuo, com todos os equipamentos auxiliares no simulador de processos Aspen Plus;
- Avaliação de Critérios de Convergência do sistema completo no estado estacionário (coluna de destilação a vácuo, forno, e reciclos circulantes);
- 3) Otimização do sistema;
- Simulação dinâmica do sistema em malha aberta, com análise de mudança de cargas na coluna.

1.1. Estrutura da dissertação.

No Capítulo 1 tem-se a apresentação da idéia geral do trabalho, a motivação para o desenvolvimento do mesmo, os objetivos gerais e os objetivos específicos a serem atingidos.

No Capítulo 2, realiza-se uma explanação sobre as características do petróleo, e sobre o modo como este é estudado para fins de processamento. Um breve levantamento de métodos para caracterização é apresentado, com foco em aspectos relevantes para o projeto e operação de unidades de fracionamento, seguido por uma explanação sobre o tratamento desta caracterização para a efetivação do projeto destas unidades. Para isso, explicam-se critérios para geração de pseudocomponentes, e apresenta-se uma metodologia para determinação das propriedades de pseudocomponentes, imprescindíveis para o desenvolvimento do projeto. Ao fim do capítulo, apresentam-se os tipos de petróleo considerados neste estudo, juntamente com sua implementação e conseqüente apresentação dos resultados. Delimitam-se neste capítulo as configurações de alimentação que serão consideradas neste trabalho como um todo.

O Capítulo 3 apresenta a implementação da coluna atmosférica no ambiente de simulação adotado neste trabalho. Partindo-se de um sistema simplificado, apresentam-se os resultados obtidos para os casos de petróleo considerados, e compara-se com os resultados obtidos da literatura. Na seqüência do desenvolvimento, apresenta-se o sistema com adição de sistemas auxiliares, tais como reciclos circulantes, com a apresentação e comparação dos resultados obtidos com a literatura. Apresenta-se neste capítulo, ainda, o procedimento adotado na implementação, bem como o procedimento adotado a fim de se atingir as especificações dos produtos considerados na configuração de coluna atmosférica adotada no trabalho.

O Capítulo 4 apresenta a implementação da coluna de destilação a vácuo. O procedimento adotado na implementação desta coluna é descrito em detalhes. Apresentamse, ainda, procedimentos de análise de fluxos do processo, bem como análises de sensitividade visando procedimentos de otimização neste equipamento. Considerações sobre as especificações dos produtos deste equipamento são consideradas.

O Capítulo 5 apresenta o procedimento de otimização da coluna de destilação a vácuo. É apresentada a descrição dos objetivos da otimização, bem como a função-objetivo adotada e restrições consideradas no procedimento de otimização. A otimização do processo foi realizada para alguns casos de composição de mistura dos óleos considerados.

O Capítulo 6 apresenta a simulação dinâmica da coluna de destilação a vácuo ligada a coluna atmosférica, analisando-se a resposta do sistema frente a variações de composição de alimentação, de vazão de alimentação, dentre outras. A simulação dinâmica neste capítulo considerou apenas a representação em malha aberta, ou seja, sem influência de sistemas de controle de saídas.

No Capítulo 7, apresentam-se resultados e conclusões gerais do trabalho desenvolvido como um todo.

No Capítulo 8, apresentam-se sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo 2 – Petróleo – métodos de caracterização e representação de componentes.

2.1. O petróleo

O petróleo não é uma mistura homogênea de hidrocarbonetos, e tão pouco uma mistura uniforme. Do ponto de vista de origem, a composição de um petróleo varia com a idade do reservatório e da profundidade de onde ele é extraído. Do ponto de vista químico, os óleos crus (petróleo bruto) são compostos por grande número de hidrocarbonetos, que vão dos gases, compostos em sua maioria com ate quatro carbonos, a compostos de até 70 carbonos, em várias conformações. Além de compostos orgânicos elementos tais como carbono e hidrogênio, tem-se a presença de compostos orgânicos com outros elementos além do carbono e hidrogênio, tais como enxofre, nitrogênio, oxigênio, e metais (vanádio, ferro e cobre). Portanto, tanto petróleo, petróleo pesado e resíduo são uma miscelânea de compostos nitrogenados, (3) compostos oxigenados, (4) compostos de enxofre e (5) constituintes metálicos. O percentual de hidrocarbonetos presentes no petróleo varia, podendo ser superior a 97% em peso em um cru leve do tipo parafínico, ou inferior a 50% em peso em um óleo pesado (Speight,1999), mas a presença dos outros tipos de compostos tem influência nas características dos produtos.

Em relação aos hidrocarbonetos presentes no petróleo, pode-se classificá-los em 3 grupos:

1- Parafinicos – hidrocarbonetos saturados com cadeias lineares ou ramificadas, mas sem estruturas cíclicas.

2- Naftênicos – hidrocarbonetos saturados contendo uma ou mais estruturas cíclicas, podendo ter uma ou mais cadeias parafínicas laterais.

3- Aromáticos – hidrocarbonetos contendo um ou mais núcleos aromáticos tais como benzenos e naftenos, podendo ter cadeias parafínicas laterais através de substituição nos anéis.

Devido à característica predominante dos hidrocarbonetos no petróleo, os óleos são classificados segundo estes; as presenças majoritárias destes grupos na composição fazem com que estes óleos sejam classificados por bases. Assim, um óleo de base parafinica é constituído, principalmente, de grupos de parafinas, um óleo de base naftênica, pela maior presença de grupos naftênicos e um óleo de base mista, com grande quantidade de ambos os grupos. Na literatura, utilizam-se duas escalas usuais, conhecidas por °API (*American Petroleum Institute*), que é uma escala expandida de densidade, e o fator de caracterização de Watson, que descreve a parafinicidade do petróleo. O °API é definido pela equação 2.1:

$$^{\circ}API = \frac{141,5}{Peso.Especifico\ a\ 15,6^{\circ}C} - 131,5 \tag{2.1}$$

Nessa escala, a água tem o valor 10, enquanto o metano líquido na pressão de saturação tem o valor 340. Esta escala pode alcançar, para petróleos pesados e os resíduos valores inferiores a 10, incluindo valores negativos. O fator de caracterização de Watson (Kw) é expresso pela equação 2.2:

$$K_{W} = \frac{T_{b}^{1/3}}{SG}$$
(2.2)

Onde :

T_b – ponto de ebulição médio, em R

SG – Peso específico a 15°C

O fator de caracterização de Watson apresenta valores inferiores a 10 para óleos muito aromáticos, e valores de até 15 para materiais parafínicos.

2.1.1. Aspectos do petróleo

O petróleo, como citado anteriormente, não pode ser visto como um composto único, e tampouco como um mero conjunto de compostos homogêneos. Trata-se de uma mistura bastante heterogênea de compostos dos mais variados tipos (hidrocarbonetos homogêneos, heterogêneos, cíclicos, sais, etc) com pesos moleculares variados (misturas de compostos que vão de um a 70 carbonos), e com pouca uniformidade, no que se refere ao tipo de reservatório e a idade do reservatório de onde se origina. Uma análise em que se pudesse descrever todo o tipo de composto presente e quantificá-lo é hoje algo inviável, mas esforços para melhorar a compreensão desta mistura complexa estão sendo feitos o que leva a um aproveitamento cada vez maior dos compostos presentes no petróleo. Para ilustrar a complexidade desta mistura denominada petróleo, a Tabela 2.1 faz uma apresentação da quantidade de compostos de possível presença no petróleo, considerando apenas o grupo parafínico em sua constituição e o tamanho dos grupos de moléculas isômeras que constituem alguns dos derivados de petróleo:

				Exemplos de cortes de destilação do
N°Carbonos	°C	°F	Isômeros	petróleo
				7
5	36	97	3	
8	126	258	18	Gasolina
10	174	345	75	
12	216	421	355	
				Diesel, combustíves aviação
15	271	519	4347	destilados intermediários
20	344	651	$3,66\ 10^5$	
				Gasóleo do
25	402	755	$3,67 \ 10^7$	vácuo
30	449	840	$4,11\ 10^9$	
35	489	912	4,93 10 ¹¹	Resíduo Atmosférico
40	522	972	$6,24\ 10^{13}$	
45	550	1022	$8,22\ 10^{15}$	
				Resíduo vácuo.
60	615	1139	$2,12 \ 10^{22}$	asfalto
			,	☐ Resíduo não
80	672	1242	$1,06\ 10^{31}$	_ destilável
100	708	1306	5,92 10 ³⁹	

Tabela 2.1 – Aspectos gerais e exemplos de frações típicas do petróleo.

Ponto de ebulição

Dessa tabela, nem todos os isômeros podem efetivamente fazer parte da constituição de um dado petróleo, mas o conjunto de possibilidades é grande. Opta-se, portanto, por uma classificação segundo grupos de compostos, seguindo algum critério. Um dos critérios mais gerais, que divide os constituintes do petróleo em grupos de compostos semelhantes, tais como os grupos de hidrocarbonetos explicados aqui, que são agrupados de acordo com uma faixa comum de ponto de ebulição, foram propostos a fim de uma melhor compreensão do petróleo (Altgelt e Boduzynski, 1994). Mas, dada a complexidade da mistura em questão, abordagens mais genéricas são aplicadas para o processamento e desdobramento do petróleo em produtos. Assim, variados métodos são usados, e seus resultados são correlacionados a uma distribuição de pesos moleculares. Estes métodos,

geralmente, fazem esta caracterização por solubilidade ou por características de destilação. Ao conjunto de informações que caracterizam um determinado petróleo, dá-se o nome de caracterização do petróleo.

2.1.2 Caracterização

No intuito de se caracterizar um petróleo em análise, Altgelt e Boduzynski (1994) enumera razões para que a destilação preceda a todos os métodos de separação:

1. A separação de um cru pela destilação em vários cortes resulta em um conjunto importante de dados.

2. Reduz o número gigantesco de moléculas diferentes, simplificando a interpretação da análise de composição realizada nestes;

3. A divisão de um óleo cru em um número de cortes (frações) facilita sua comparação com outros óleos e com óleos crus. Sem esta destilação primária em cortes específicos, comparações de diversas amostras seriam muito menos significativas.

4. Ao se olhar para as mudanças na composição da alimentação para os produtos em processos de refino, a subdivisão de ambos em alguns cortes faz a comparação mais detalhada e significante.

5. O estudo de cortes de baixa ebulição aumenta a compreensão das frações de alta ebulição menos tratáveis e ajuda no planejamento da análise destes.

A destilação reduz tanto a faixa de peso molecular quanto a variedade de grupos químicos. Tome-se a nafta como exemplo com seu ponto de ebulição entre 30 e 220°C. O número de carbono varia de 4 a 10 e contém parafinas e naftenos com até 2 ou 3 anéis e monoaromáticos com até um anel aromático. Seu limite superior de ebulição proíbe a nafta de conter naftalenos, deixando de lado qualquer aromático com número maior de anéis.

Destilados intermediários têm ponto de ebulição de 220 a 345°C. Seu número de carbonos varia de 10 a 20, excluindo não apenas moléculas com alto número de carbonos, mas também aquelas com menor número. Com o aumento do ponto de ebulição, a variedade de composto de alto ponto de ebulição aumenta rapidamente, mas cada vez mais espécies de baixo ponto de ebulição, que fazem parte do óleo cru, são excluídas.

O efeito da destilação pode ser verificado pela Figura 2.1, que apresenta os diversos compostos com pesos moleculares similares; na Figura, os cortes estão indicados pelas linhas verticais, apresentando alguns de seus produtos.



Figura 2.1 – Produtos de corte de petróleo. (Altgelt e Boduzynski,1994)

Na realidade, os cortes não são tão precisos quanto os indicados na Figura 2.1, apresentando superposições (*overlaps*) substanciais entre si. Apesar disso, a destilação limita as faixas de peso molecular dos vários compostos em limites superior e inferior, apesar de que o peso molecular de um tipo de um tipo de composto para outro, como nalcanos e aromáticos, seja um pouco diferente. Neste trabalho, serão brevemente comentados os métodos de destilação aplicados na análise e caracterização dos crus.

2.1.3. Métodos de destilação

A destilação separa moléculas primordialmente pelas diferenças em sua pressão de vapor. A pressão de vapor diminui como o aumento do peso molecular (PM), aromaticidade e polaridade, e é inversamente proporcional ao ponto de ebulição. Dos métodos de destilação, podem-se distinguir duas grandes categorias: destilação em coluna e destilação molecular.

Na destilação molecular, aplica-se um alto vácuo. A amostra passa rapidamente como um filme por uma superfície aquecida. As moléculas mais leves evaporam-se e são condensadas em uma superfície resfriada. O vácuo precisa ser suficientemente alto para garantir que o livre percurso médio das moléculas destiladas seja menor que a distância entre as superfícies aquecida e resfriada.

2.1.4. Métodos de destilação em batelada

As destilações por colunas são realizadas a altas pressões, à pressão atmosférica e a pressões reduzidas. Pressões altas são usadas principalmente em destilações de refino de larga escala com destilados de baixo ponto de ebulição, resultando em altas temperaturas de destilação e economia do uso de fluido refrigerante para resfriamento no condensador.

Já as destilações por colunas à pressão atmosférica e a alto ou médio vácuo são normalmente conduzidas em batelada. Antes da destilação, a alimentação é inserida no refervedor ligado ao fundo da coluna e o produto do topo progressivamente aumenta seu ponto de ebulição e complexidade de composição, enquanto o óleo no fundo é lentamente vaporizado. Não há reciclo do topo para a coluna, pois o produto é resfriado e segue para outro reservatório. Devido a isso, a destilação ocorre em não-equilíbrio. Este tipo de destilação é preferido para caracterização de frações, por ser mais rápido do que uma destilação de ponto de ebulição verdadeiro.

Como se pretende por meio dos métodos de destilação uma descrição da constituição do cru em estudo, ou de um *blend* (mistura de dois ou mais crus) utilizam-se equipamentos padronizados segundo normas ASTM (*American Society for Testing and Materials*). Para frações de petróleo, procedem-se métodos de destilação em equipamentos padronizados segundo essas normas (ASTM D86 e ASTM D1160) por serem as formas mais usuais para se medir curvas de ebulição, apresentada na Figura 2.2:



Figura 2.2 – Equipamento para levantamento de curva ASTM D1160 (Gray, 1994)

A temperatura do vapor, e o volume de destilado são tomados na medida em que o óleo em análise é evaporado. Para frações leves, a determinação ASTM D86 exige o uso de pressão atmosférica, enquanto a determinação ASTM D1160 usa destilação a vácuo abaixo de 130 Pa para determinação do conteúdo de resíduo de vácuo. Nos dois casos, o resultado é um gráfico de temperatura por volume destilado. O resíduo é o material não volatilizado que resta no equipamento após a conclusão da destilação: resíduo atmosférico, para ASTM D86 e resíduo de vácuo para ASTM D1160. As perdas do processo (volume inicial – volume coletado – volume de resíduo) devem-se a componentes voláteis que não são condensáveis.

No caso da destilação a vácuo, a temperatura real no equipamento é mantida abaixo de 250°C para prevenir a decomposição do óleo, mas os pontos de ebulição normais dos compostos da amostra vão até 525°C.

Dos dados coletados por estes equipamentos padronizados, as temperaturas são medidas à pressão de operação do equipamento, sendo convertidas a uma base padrão de 101,3 kPa usando tabelas ou gráficos. Maxwell e Bonnett (1955, apud Gray, 1994) propuseram uma equação que converte a temperatura de ebulição medida (T_m) para o ponto de ebulição normal (T_n) pela equações 2.3, 2.4 e 2.5:

$$T_n = \frac{748,1(A+0,0002867)}{(1/T_m) - 0,0002867 + 0,2145(A+0,0002867)}$$
(2.3)

$$A = \frac{5,9082 - \log_{10} P}{2926,8526 - 43 \cdot \log_{10} P}; P < 0,0387 \, psia$$
(2.4)

$$A = \frac{5,0442 - \log_{10} P}{2499,0330 - \log_{10} P}; 0,0387 \le P \le 14,7 \, psia$$
(2.5)

Com T_n e T_m em °F, P é a pressão medida no equipamento (psia) quando o líquido ferve sob vácuo. A equação 2.3 é baseada em frações e fator de caracterização de Watson $K_W = 12$. Para amostras com $K_W < 12$, usa-se a equação 2.6:

$$T_{n,atual} = T_n - 2.5 \cdot F \cdot (K_W - 12) \log_{10} (P/14,696)$$
(2.6)

Onde:

F=0 para
$$T_n \le 93,3^{\circ}C$$

F=-1 + 0.605 T_n (93,3< $T_n < 204,4^{\circ}C$)
F=1 para $T_n > 204,4^{\circ}C$

Tsonopoulos (1986, apud Gray, 1994) descobriu que estas funções trabalham bem para pressões abaixo da atmosférica podendo ser aplicado a frações convencionais.

Com as curvas ASTM padronizadas, técnicas gráficas e numéricas foram desenvolvidas para converter os dados de curvas ASTM D86 e D1160 para PEV à pressão do método ASTM, para então converter a PEV para 101,3 KPa, pelas equações 2.5 – 2.6. A conversão de uma curva ASTM D1160 para PEV assume pontos abaixo de 50% idênticos fazendo correções para pontos acima de 50% destilado.

Gráficos de correlações empíricas para conversão de PEV para EFV- Vaporização Flash de Equilíbrio (*Equilibrium Flash Vaporization*) são dados pelo API Technical Data Book (1983) e por Edmister (1984); o método recomendado entretanto, é usar equações de estado para calcular qualquer volume de destilado ou de equilíbrio.

2.1.5. Destilação para cálculo de curva de ponto de ebulição verdadeiro

Outro método de se determinar o comportamento da destilação é usar condições próximas ao equilíbrio, apesar de ser uma tarefa que consome muito tempo. Este método usa uma coluna com cerca de 15 pratos teóricos e uma razão de refluxo de no mínimo 5:1. O método ASTM é o D2892. Os pontos de ebulição verdadeiros, essenciais para correlacionar propriedades tais como peso molecular e propriedades críticas, são dados pelo refluxo do topo da coluna. A abordagem mais comum em alternativa a este método é a conversão de dados ASTM para curvas PEV.

2.1.6. Curva de vaporização de equilíbrio (EFV)

Todos os métodos de destilação são incrementais, removendo os vapores da coluna e deixando um óleo cada vez mais pesado para ser destilado. Estas medições não correspondem ao equilíbrio líquido-vapor de um óleo onde todos os componentes do vapor são mantidos em contato com o líquido. As curvas de vaporização *flash* de equilíbrio não são usualmente executadas devido ao tempo e ao consumo de material, sendo preterida pela destilação em batelada (ASTM D86 e ASTM D1160) por serem mais rápidas.

Numa curva de vaporização *flash* de equilíbrio, o ponto de ebulição inicial é o ponto de bolha da fração estudada, e o ponto final é o ponto de orvalho. Uma família de curvas em diferentes pressões pode ser levantada, levando a uma predição de comportamento de fases mais precisa, especialmente em pressões de operação dos equipamentos a serem dimensionados. Apesar disso, o procedimento normal é calcular condições de equilíbrio usando pseudocomponentes de curva de ebulição por meio de equações de estado.

2.1.7. Seleção e cálculo de propriedades de pseudocomponentes

2.1.7.1. Pontos de Ebulição Médios

A curva de ebulição representa uma distribuição de propriedades, mas para o uso de pseudocomponentes, o cálculo das médias das propriedades é necessário. Uma média de uma propriedade contínua, no caso, temperatura (T), em uma faixa de "a" a "b" é definida por:

$$\overline{T} = \int T(q) dq / (b-a) \tag{2.7}$$

Portanto, para a temperatura média, deve-se integrar a área da curva temperaturaquantidade, que no caso da análise de petróleos, pode ser temperatura por percentual de volume, percentual do peso ou de moles. Esta quantidade varia de acordo com a forma em que a curva foi amostrada. Para cada modo em que a quantidade foi amostrada, tem-se um valor diferente. Por exemplo, uma média de temperaturas de ebulição por peso desvia-se para os componentes mais densos, enquanto uma média de temperatura por volume desviase para os componentes menos densos. Portanto, um gráfico apresentado na Figura 2.3 apresenta a correção necessária para cada tipo de quantidade amostrada.



Na Figura, VABP é a curva de destilação convertida para pressão atmosférica em base de volume percentual; MABP é a curva em base molar; WABP é a curva em base mássica e MeABP é a média dos pontos de ebulição médios. Quanto mais estreito for o corte, menor será o valor da inclinação e menor será o termo de correção. Para frações com
corte na faixa de 20 a 50°C, a correção é desprezível. A média dos pontos de ebulição médios é usada na correlação de várias propriedades, tais como peso molecular:

$$MeABP = 1/2 \left[MAPBP + \left(\sum v a_i T a_i^{1/3} \right)^3 \right]$$
(2.8)

2.1.7.2. Comportamento de fase de misturas não definidas

O cálculo de propriedades de um fluido como o petróleo e seus derivados não pode ser realizado para cada componente. Baseando-se em parâmetros como peso molecular, temperatura crítica e fator acêntrico para misturas complexas como petróleo definem-se os chamados pseudocomponentes. Estes pseudocomponentes compreendem, na verdade, um número de compostos com pontos de ebulição em uma pequena faixa de temperatura. Aos pseudocomponentes são atribuídos valores de parâmetros que calculam o comportamento das fases em um processo.

2.1.7.3. Pseudocomponentes

A seleção dos pseudocomponentes é feita ponderando-se a necessidade de se representar o comportamento da mistura em relação ao custo computacional e à disponibilidade dos dados. Um procedimento razoável é definir em quantos cortes, ou produtos, um determinado óleo será desdobrado. De acordo com os cortes, os pseudocomponentes são definidos no interior deste, buscando obter por meio destes uma boa representatividade do corte em questão. Pelo fato dos pseudocomponentes virem de uma propriedade média, estes são corrigidos pela inclinação da curva no intervalo do corte considerado.

2.1.7.4. Estimativa das propriedades críticas

Para um ponto crítico verdadeiro, a fase líquida e vapor são indistinguíveis. O ponto crítico verdadeiro é uma característica tanto de componentes puros quanto de misturas. Para misturas, o ponto crítico verdadeiro não é uma propriedade aditiva, sendo necessário o uso de propriedades pseudocríticas.

Para frações de petróleo, estimam-se as temperaturas pseudocríticas e pressões de mistura, juntamente com peso molecular e fator de acentricidade com correlações que envolvem ponto de ebulição médio e °API.

15

Segundo o princípio dos estados correspondentes, Twu (1984, apud Gray, 1994) usa n-alcanos como compostos de referência, e no método proposto abaixo, aplicável a cálculos computacionais, tem-se as correlações para as propriedades das n-alcanos como se segue:

Temperatura crítica (Twu, 1984)

$$T_{c}^{o} = T_{b} \left(\begin{array}{c} 0,533272 + 0,191017 \times 10^{-3} T_{b} + 0,779681 \times 10^{-7} T_{b}^{2} - 0,284376 \times 10^{-10} T_{b}^{3} \\ + 0,959486 \times 10^{28} / T_{b}^{13} \end{array} \right)^{-1}$$
(2.9)

Volume crítico (Twu, 1984)

$$V_{c}^{\circ} = \left[1 - \left(0,419869 - 0,505839\alpha - 1,56436\alpha^{3} - 9481,7\alpha^{14}\right)\right]^{-8}$$
(2.10)

Peso específico (Twu, 1984)

$$SG^{\circ} = 0,843593 - 0,128624\alpha - 3,36159\alpha^{3} - 13749,5\alpha^{12}$$
(2.11)

Peso molecular (Twu, 1984)

$$MW = \exp(5,71419 + 2,71579\theta - 0,286590\theta^2 - 39,8544/\theta - 0,155488/\theta^2) - 24,77522\theta + 35,155\theta^2$$
(2.12)

Pressão Crítica (Twu, 1984) $P_{c}^{\circ} = (3,83354 + 1,19629\alpha^{1/2} + 34,8888\alpha + 36,1952\alpha^{2} + 104,193\alpha^{4})^{2}$ (2.13) Onde $\alpha = 1 - T_{b} / T_{c}^{\circ}$ $\theta = \ln MW^{\circ}$ Temperatura em °R, volume em pé³/lb-mol e pressão em psia.

As propriedades críticas de cada pseudocomponente são calculadas com base na propriedade correspondente da série hómologa de n-alcanos. A temperatura crítica do pseudocomponente é tratada como temperatura crítica (T_c) e o peso específico (SG^o) como sendo o do n-alcano com o mesmo ponto de ebulição. Como pode ser visto nas equações, com T_b e SG sendo o ponto de ebulição (em R) e o peso específico do pseudocomponente:

$$T_{C}(psia) = T_{C}^{\circ} [(1+2f_{T})/(1-2f_{T})]^{2}$$

$$f_{T} = \Delta SG_{T} [-0,362456/T_{B}^{1/2} + (0,0398285 - 0,948125/T_{b}^{1/2})\Delta SG_{T}] \quad (2.14)$$

$$\Delta SG_{T} = \exp[5(SG^{\circ} - SG)] - 1$$

Os volumes críticos, pressões críticas e pesos moleculares dos pseudocomponentes estão expressos pelas expressões abaixo:

$$V_{C} = V_{C}^{\circ} \left[(1 + 2f_{V}) / (1 - 2f_{V}) \right]^{2}$$

$$f_{V} = \Delta SG_{V} \left[0.466590 / T_{b}^{1/2} + (-0.182421 + 3.01721 / T_{b}^{1/2}) \Delta SG_{V} \right]$$

$$\Delta SG_{V} = \exp \left[4 \left(SG^{\circ 2} - SG^{2} \right) \right] - 1$$
(2.15)

$$P_{C} = P_{C}^{\circ} (T_{C} / T_{C}^{\circ}) (V_{C}^{\circ} / V_{C}) [(1 + 2f_{P}) / (1 - 2f_{P})]^{2}$$

$$f_{P} = \Delta SG_{P} \begin{bmatrix} (2,53262 - 46,1955 / T_{B}^{1/2} - 0,00127885T_{B}) + \\ (-11,4277 + 252,14 / T_{B}^{1/2} + 0,00230535T_{B}) \Delta SG_{P} \end{bmatrix}$$

$$\Delta SG_{P} = \exp[0.5(SG^{\circ} - SG)] - 1$$

$$(2.16)$$

$$\ln MW = \ln MW^{\circ} [(1 + 2f_{m})/(1 - 2f_{m})]^{2}$$

$$f_{m} = \Delta SG_{m} [x + (-0.0175691 + 0.193168/T_{B}^{-1/2})\Delta SG_{m}]$$

$$x = |0.0123420 - 0.328086/T_{b}^{-1/2}|$$

$$\Delta SG_{m} = \exp[5(SG^{\circ} - SG)] - 1$$
(2.17)

Fator acêntrico – Edmister(1958, apud Gray,1994)

$$\omega = 0,1861 \frac{\ln P_c}{(T_c/T_b - 1)} - 1$$
Com P_c em atmosferas,e
(2.18)

Fator acêntrico – Kesler e Lee (1976, apud Gray, 1994)

$$\omega = \left[\ln P_b / P_c - 5,92714 + 6,09648T_b / T_c + 1,28862 \ln T_b / T_c + 0,43577(T_b / T_c)^6 \right] / \left[15,2518 - 15,2518 - 15,6875T_c / T_b - 13,4721 \ln T_b / T_c + 0,43577(T_b / T_c)^6 \right]$$
(2.19)
$$\left(para \frac{T_b}{T_c} > 0,8 \right)$$

Onde $K_{\rm W}$ é o fator de caracterização de Watson.

2.2. Implementação de curvas de caracterização de petróleos em ambiente de simulação.

Para a implementação de curvas de caracterização de petróleos em ambiente de simulação, fez-se uso do simulador de processos ASPEN PLUS, versão 12.1. O simulador de processos conta com uma pré-configuração de seleção de unidades para apresentação de resultados, e pré-seleção de componentes e métodos numéricos de cálculo, específicos para vários processos. Tais pré-configurações são denominadas por "*Templates*", e sua escolha é disponibilizada ao se comandar uma nova simulação. Para todas as simulações apresentadas neste trabalho, optou-se pelo uso de um *template* específico para processos petroquímicos, denominado por "*petroleum with metric units*".

Para implementação de petróleo e a caracterização do mesmo, utiliza-se o modo de simulação "*assay data analysis*". Uma vez introduzidos os dados do petróleo que se deseja trabalhar no software, executando-se a simulação tem-se o petróleo caracterizado, com pseudocomponentes e propriedades para uso em processos.

2.2.1. Tipos de Petróleo considerados neste trabalho.

Neste trabalho foram considerados dois tipos de petróleo, sendo um do tipo leve(°API 36), e outro do tipo pesado (°API 20). As especificações dos óleos, tais como curva PEV e análise de gases leves estão apresentadas nas Tabelas 2.2 e 2.3. Introduziu-se, também aqui uma série de misturas entre os óleos considerados (*blends*), seguindo as proporções apresentadas na Tabela 2.4.

Curva	a PEV	Análise de gases leves		
% Destilado	Temperatura (°C)	Componente	Volume (% amostra)	
5	45	Etano	0,0013	
10	82	Propano	0,0078	
30	186	Isobutano	0,0049	
50	281	n-Butano	0,0136	
70	382	Isopentano	0,0105	
90	552	n-Pentano	0,0130	

Tabela 2.2 – Especificação petróleo leve (°API 36).

Curva PEV		Análise de gases leves		
% Destilado	Temperatura (°C)	Componente	Volume (% amostra)	
5	133	Etano	0	
10	237	Propano	0,0004	
30	344	Isobutano	0,0004	
50	482	n-Butano	0,0011	
70	640	Isopentano	0,0014	
90	Indisponível	n-Pentano	0,0016	

Tabela 2.3 – Especificação petróleo pesado (°API 20).

Tabela 2.4 - Especificação dos blends considerados no trabalho.

Denominação do blend	% de óleo Pesado (em peso)	% de óleo Leve (em peso)
90H10L	90	10
75H25L	75	25
50H50L	50	50
25H75L	25	75
10H90L	10	90

Os *blends* considerados neste trabalho visam verificar análises posteriores. Tanto para casos de óleos quanto para *blends* e gases leves, os compostos são incluídos como componentes. O software faz uma diferenciação de compostos em tipos. Portanto, os gases leves, que são compostos reais, são do tipo convencional, os tipos de petróleo são compostos do tipo "amostra", e as misturas são do tipo "*blend*". No caso de compostos não-convencionais (tipos de petróleo e blends), as informações complementares são introduzidas em outro módulo, denominado "*assay/blend*". Neste módulo, fornecem-se, também, os métodos a serem adotados tanto para a seleção de pseudocomponentes, quanto para o cálculo das propriedades destes. Os dados para os procedimentos de caracterização dos óleos e a geração dos pseudocomponentes, bem como para o cálculo foram ajustados da seguinte forma:

- Caracterização de Petróleos e (Assay/Blend characterization):
 - o Tipo de curva de destilação: PEV, com base em volume líquido
 - o Análise de Gases Leves: Fração de volume padrão
 - Método de predição de propriedades de pseudocomponentes: Twu ASPEN.
- Opções de procedimento para processamento de curvas (Assay procedures/Curve Processing options):
 - o Ponto de ebulição inicial (Initial boiling point): 0,55 %
 - Ponto de ebulição final (Final boiling point): 99 %
 - Método de extrapolação (*Extrapolation method*): Probability.
- Método de conversão de curva de destilação (Distillation curve conversion method):
 - o ASTM D86 para PEV: Edmister
 - o ASTM D1160 para PEV: Método API 1963

Os pontos de ebulição inicial e final dizem respeito às extrapolações utilizadas para regiões fora da faixa dos dados fornecidos para os crus. Para a geração dos pseudocomponentes, optou-se por uma distribuição de pesos de cálculo (*weighting factor*) de 50% entre os dois tipos de petróleo, ficando assim os pseudocomponentes calculados para os *blends* determinados a partir dos pseudocomponentes gerados a partir destes dois tipos de petróleos.

2.3. Resultados da implementação.

Uma comparação entre os métodos de predição de propriedades foi realizada, onde se constatou que os resultados para os métodos mais usados (Lee-Kesler e Twu). A opção de corte utilizada (corte definido por usuário) em comparação com a opção de autocorte também foi objeto de estudo. Os resultados são apresentados na Tabela 2.5 e nas Figuras 2.4 e 2.5.

Corte por definição do usuário			Auto Cor	te (ADA – ASPEN	1)
Ponto inicial °C	Ponto final °C	Nº cortes	Ponto inicial °C	Ponto final °C	Nº cortes
20	129	8	37,77	426,66	28
211	343	8	426,66	648,88	8
343	454	8	648,88	871,11	4
454	538	8			
538	1000	4			

Tabela 2.5 – Critérios para corte para geração de pseudocomponentes.



Figura 2.4 – Comparação métodos e opções de corte – petróleo leve.



Figura 2.5 – Comparação métodos e opções de corte – petróleo pesado.

Percebe-se que os resultados obtidos para o método de Twu não apresentaram variação significativa, no que se refere ao tipo de corte adotado (autocorte do simulador de processos e sistema de corte por entrada do usuário). As respostas dos dois métodos foram semelhantes, com desvios apenas nas regiões fora da região dos dados de entrada, tanto para o petróleo leve quanto para o petróleo pesado. Uma vez que as opções não trouxeram perda no que tange a qualidade da resposta, optou-se pela opção de uso de autocorte. A opção pelo fator de peso entre os óleos para o cálculo dos pseudocomponentes (ambos com fator 1) considerados neste trabalho refletiu numa perda de reprodutibilidade dos dados para o petróleo pesado, com leve diferença entre os valores computados para PEV a partir dos pseudocomponentes gerados e dados de entrada. Pelo fato de que o método de Twu ter apresentado menor diferença entre os valores calculados para PEV a partir dos pseudocomponentes e dados de entrada, optou-se por este método.

Para se avaliar a resposta do simulador com relação a representação dos dados de entrada, apresentam-se nas Figuras 2.6 e 2.7 os resultados da implementação:



Figura 2.6 – Comparação dos resultados da caracterização – petróleo leve.



Figura 2.7 – Comparação dos resultados da caracterização – petróleo pesado.

As Figuras 2.6 e 2.7 apresentam os dados fornecidos ao simulador de processos e a curva gerada a partir destes dados. Pode-se notar, ainda, o resultado da extrapolação comandada, com a manutenção da tendência a partir da curva de dados. A geração dos

pseudocomponentes pode ser observada para as Figuras 2.8 e 2.9 a seguir, onde estes tiveram suas frações volumétricas dispostas de modo semelhante a uma distribuição cumulativa de frações volumétricas.



Figura 2.8 – Comparação entre PEV óleo leve e pseudocomponentes.



Figura 2.9 – Comparação entre PEV óleo pesado e pseudocomponentes.

Os pseudocomponentes foram distribuídos de acordo com seu ponto de ebulição normal, e sua fração volumétrica, juntamente com a PEV calculada a partir dos dados de entrada para os dois tipos de petróleo considerado para o cálculo dos mesmos. Na Figura 2.8 verifica-se que os pseudocomponentes gerados a partir do software acompanham a PEV calculada para o petróleo leve, acompanhando inclusive a distribuição de frações para os gases leves (parte inicial do volume destilado). Já na Figura 2.8, verifica-se que os pseudocomponentes têm um desvio acentuado em relação a PEV calculada apenas no trecho onde os dados de entrada para o petróleo pesado não eram disponíveis. Apesar disso, conclui-se que os pseudocomponentes gerados possuem representatividade satisfatória para ambos os tipos de petróleo considerados.

2.4. Conclusões

Os óleos considerados neste trabalho foram implementados satisfatoriamente. As análises referentes aos métodos de caracterização condizem com as observações da literatura (Altgelt e Boduzynski, 1994; Gray, 1994; Speight, 1999). O método que apresentou melhor ajuste aos dados de entrada foi o método proposto por Twu. O estudo sobre o método para corte do petróleo para o cálculo dos pseudocomponentes, revelou que as opções de autocorte e corte definido por usuário apresentam resultados semelhantes. A curva PEV calculada a partir dos pseudocomponentes gerados apresentou desvios significativos no intervalo onde os dados não estavam disponíveis, devido tanto a ausência de dados para a parte final da curva, quanto pela distribuição de pesos no cálculo dos pseudocomponentes a serem utilizados ao longo deste trabalho.

Capítulo 3 – Destilação Atmosférica.

Neste capítulo, apresenta-se uma breve descrição do processo, seguido de considerações adotadas para a implementação do processo no simulador de processos ASPEN PLUS. Considerações quanto às configurações foram realizadas, partindo-se de uma configuração convencional sem reciclos circulantes, até se atingir a configuração convencional que faz uso de reciclos circulantes. Apresenta-se aqui, ainda, uma descrição dos procedimentos adotados para implementação e adequação dos produtos às especificações, bem como uma descrição do procedimento para configuração final com reciclos circulantes. Os procedimentos foram comparados com resultados da literatura (Ji e Bagajewicz, 2001).

3.1. Destilação Atmosférica – Descrição do processo.

Um processo de destilação atmosférica é apresentado na Figura 3.1. Inicialmente, o cru dessalgado é pré-aquecido em uma rede de trocadores de calor por correntes de calor de outras partes da planta, como por exemplo, correntes de produto da coluna atmosférica. O óleo cru pré-aquecido entra em um forno, onde é aquecido a altas temperaturas, de 340°C a 370°C. Acima desta faixa, a taxa de decomposição cresce, levando à formação de coque no equipamento e dano à unidade. (Speight, 1999).



Figura 3.1 – Esquema de destilação atmosférica. (sem reciclos circulantes)

Na zona de expansão (área sem pratos) apresentada na Figura 3.1, a alimentação parcialmente vaporizada é separada nas fases vapor e líquido. A fase vapor contém, na extensão de sua curva de ponto de ebulição verdadeiro (PEV), todos os produtos presentes em todas as retiradas laterais de produtos. A fase líquida é composta por componentes leves na faixa dos produtos gasóleo atmosférico (GO) e diesel, juntamente com todos os componentes pesados que não podem ser destilados à pressão atmosférica. É necessária a remoção destes componentes do resíduo através de esgotamento por injeção de vapor no fundo da coluna. Pratos com campânulas ou pratos simples são comumente usados. A coluna pode ser operada com refervedor, mas o uso de vapor no fracionamento do óleo é mais econômico devido ao considerável grau de separação quando comparado ao uso do refervedor (Nelson,1969).

Neste esquema, a nafta é removida no topo da coluna, enquanto querosene, diesel e gasóleo são removidos como produtos laterais. Estes produtos vão para colunas de esgotamento, que removem os componentes leves, retornando esses à coluna principal na fase vapor no prato imediatamente acima ao prato de retirada do produto lateral. As colunas laterais permitem o melhoramento do Gap 5-95 entre as frações, que significa em um melhor grau de separação entre as frações. O termo Gap 5-95 pode ser entendido como a diferença entre a temperatura de uma curva ASTM D86 em que se vaporiza 5% de uma fração de produto e a temperatura de curva ASTM onde 95% da fração de um produto adjacente mais leve é vaporizado.

O conjunto dos produtos retirados da coluna principal é definido de acordo com os objetivos da refinaria, característica dos óleos e misturas (*blends*) considerados. Estes produtos podem ser vendidos como produtos após processamentos posteriores em outras unidades.

Existem muitas especificações e padrões para os produtos, entre os produtos e os pontos de ebulição dos produtos nessa seção, e o conjunto dos produtos depende também das especificações adotadas. Por exemplo, o conjunto de produtos de retirada da coluna atmosférica pode ser composto por nafta, querosene, diesel, gasóleo e resíduo atmosférico, mas o equipamento pode gerar também outros conjuntos de produtos. De acordo com os propósitos, podem-se ter produtos tais como nafta leve, nafta pesada, querosene, diesel leve e diesel pesado. Para este trabalho, considera-se como conjunto de produtos da coluna

atmosférica nafta (que em algumas referências é denominada gasolina), querosene, diesel e gasóleo, conforme apresentado na Figura 3.1.

As colunas atmosféricas são operadas com taxa de sobrevaporizado entre 2 e 3%. A taxa de sobrevaporizado é definida como o fluxo volumétrico do líquido descendente no prato acima da zona de expansão pelo fluxo volumétrico do vapor ascendente proveniente da zona de expansão. A função deste líquido é a de garantir um refluxo adequado nos pratos entre a zona de expansão e o primeiro prato de retirada de produto a fim de se manter fluxo de líquido descendente nos pratos entre esses dois pontos da coluna (Watkins,1973) e evitar a secagem dos pratos. Para se reduzir a carga do condensador, refluxos circulantes são usados. Os refluxos circulantes permitem a redução do fluxo de vapor na coluna devido à redução da temperatura nos estágios onde a corrente de saída desses retorna à coluna. Esta redução do fluxo de vapor no topo da coluna, reduzindo o vapor de deveria ser condensado no condensador. Desta forma, com a redução do fluxo de vapor no topo da coluna, a carga do condensador pode ser reduzida. Os reciclos circulantes permitem a remoção de calor não apenas no condensador, mas em outras seções da coluna. Neste trabalho, três reciclos circulantes foram instalados na coluna atmosférica.

3.2. Implementação da simulação da coluna atmosférica.

Para a implementação da coluna atmosférica no ambiente de simulação, baseou-se em alguns trabalhos da literatura (Bagajewicz, 2001; Watkins,1973). Levou-se em conta considerações quanto aos métodos de predição de propriedades termodinâmicas e aos métodos adotados para convergência e cálculos dos equipamentos.

3.2.1. Cálculo de propriedades

O simulador de processos ASPEN PLUS organiza os métodos de predição de propriedades em "pacotes de cálculo de propriedades". Estes pacotes termodinâmicos são disponibilizados em sua totalidade, ao se optar por uma simulação em modo *"Flowsheet*" sem *Templates*, ou são pré-selecionados ao se optar por uma simulação em modo *Flowsheet* com algum *Template* específico para a simulação de um determinado processo, como o que foi realizado neste trabalho. Os pacotes termodinâmicos determinam a totalidade dos métodos a serem aplicados. A escolha do pacote de cálculo de propriedades, e algumas das propriedades calculadas por ele são apresentadas na Tabela 3.1:

Tipo de processo	Refinery
Método primário	BK-10
Descrição do método primário	
Cálculo da água do processo	STEAMNBS
Solubilidade da água	2
Coeficiente de fugacidade para fase vapor	ESIG0
Coeficiente de fugacidade para fase líquida	BK-10
Entalpia Líquido	HLMX13
Volume Líquido	VLMX20

Tabela 3.1 – Métodos de cálculo de propriedades adotados.

Na tabela 3.1, optou-se pelo método primário BK-10 por ser adequado tanto para destilação atmosférica quanto para destilação à vácuo. Justificando a escolha, pode-se citar o alcance da faixa de aplicação deste método, que vai desde aplicações à vácuo até pressões moderadas (algumas atmosferas) . O método de propriedades BK-10 usa as correlações de coeficientes de partição K-10 para a fase líquida e o modelo de gás ideal para fase gasosa. As correlações foram desenvolvidas das tabelas K-10 para componentes reais e frações de óleo. Os componentes reais incluem 70 hidrocarbonetos e gases leves. No caso das frações de óleo, implementações foram realizadas a fim de que fossem incluídas frações de óleo pesado (Cajander et al., 1960)

Completando a descrição do método, temos a descrição de outros cálculos realizados. O cálculo da água do processo é realizado por correlações baseadas nas tabelas de vapor NBS/NRC; o valor "2" para a solubilidade da água diz respeito à maneira pela qual esse componente será calculado. No caso, assumindo solubilidade 2, o coeficiente de partição K será calculado pela correlação de solubilidade para sistema insaturado, tendo sua fase vapor calculada pelo método de propriedade primário (no caso BK-10). O coeficiente de fugacidade para fase vapor, é modelado como gás ideal para a fase vapor (ESIGO), e a fase líquida tem seu coeficiente calculado por correlações de tabelas BK-10. A Entalpia

molar de mistura de líquido é calculada pelo modelo de Lee-Kesler (HLMX13), e o volume molar líquido são calculados usando o modelo da API.

A entalpia molar de mistura de líquido é calculada pelo modelo de Lee-Kesler, determinada por:

$$H_m^{ig} + \left(H_m^l - H_m^{ig}\right) \tag{3.1}$$

O volume molar líquido para mistura, usa o procedimento API e o modelo de Rackett. Assume-se mistura ideal:

$$V_m^l = x_p V_p^l + x_r V_r^l \tag{3.2}$$

Onde:

 x_p = fração molar dos pseudocomponentes

 x_r = fração molar dos componentes reais

Para os pseudocomponentes, aplica-se o procedimento da API:

$$V_p^l = fcn(T, T_b, API)$$
(3.3)

Onde:

Fcn = Correlação baseada na Figura API 6A3.5

O método para o cálculo da água do processo, é um método de "água livre". Neste tipo de método, calculam-se propriedades para fase orgânica por um método (o método primário, no caso BK-10), e para fase aquosa (no caso método STEAMNBS). O coeficiente da água na fase orgânica é dado por:

$$K_{wt} = \frac{\gamma_{wt} \varphi_{wt}^{*,l}}{\varphi_{wt}^{v}}$$
(3.3)

Onde:

 γ_{wt} = coeficiente de atividade da água na fase orgânica;

 $\varphi_{wt}^{*,l}$ = coeficiente de fugacidade da água pura, liquida usando-se o método para o cálculo da fase aquosa;

 φ_{wt}^{v} = coeficiente da água na mistura da fase vapor, calculado pelo o método de propriedade principal.

Os métodos para os cálculos de γ_{wt} e φ_{wt}^{v} são selecionados de acordo com o número para solubilidade da água (Tabela 3.1). Para solubilidade = 2, temos o cálculo dado por:

$$\gamma_w = f(T, x_w) \tag{3.4}$$

Onde:

$$\gamma_{wt} = \frac{1}{x_{wt}^{sol}}$$
 quando $x_{wt} = x_{wt}^{sol}$,

e x_{wt}^{sol} é a solubilidade limite da água na fase orgânica.

A solubilidade limite da água na fase orgânica x_w^{sol} é calculada como uma média ponderada de fração molar das solubilidades da água em cada espécie orgânica (leia-se, pseudocomponentes e gases leves):

$$x_{wt}^{sol} = \frac{a}{1+a}$$

$$a = \sum x_i \frac{x_{wi}^{sol}}{1-x_{wi}^{sol}}$$

$$(3.5)$$

Onde:

 x_i = fração molar livre de água na *i*-ésima espécie orgânica;

 x_{wi}^{sol} = fração molar da solubilidade da água na *i*-ésima espécie orgânica.

O valor de x_{wi}^{sol} é calculado como sendo função da temperatura, usando um modelo de solubilidade, denominado WATSOL. O modelo WATSOL calcula a solubilidade da água em uma fase líquida rica em hidrocarbonetos. A expressão para a fração molar líquida de água na *i*-ésima espécie de hidrocarboneto é dada por:

$$\ln x_{wi} = C_{1i} + \frac{C_{2i}}{T} + C_{3i}T$$
(3.6)

31

Onde os parâmetros são dados por:

$$C_{1i} = f(T_{bi}, ASG_i, M_i) \tag{3.7a}$$

$$C_{2i} = f(T_{bi}, ASG_i, M_i)$$
(3.7b)

$$C_{3i} = f(T_{bi}, ASG_i, M_i) \tag{3.7c}$$

Onde:

 T_{bi} = temperatura de ebulição *i*-ésimo componente;

 ASG_i = peso específico *i*-ésimo componente;

 M_i = fração molar *i*-ésimo componente.

3.2.2. Configurações adotadas

Uma vez implementados os tipos de petróleo, e seus *blends*, procedeu-se com o estudo da coluna atmosférica com três configurações distintas (ou casos distintos) pelo tipo de alimentação utilizado, sendo elas:

- Configuração com petróleo leve;
- Configuração com blend 50% leve, 50% pesado;
- Configuração com petróleo pesado.

As especificações dos *blends* apresentadas na Tabela 2.4 visaram a auxiliar na convergência a ser atingida para as três configurações apresentadas neste capítulo. Deste modo, partindo-se da configuração com petróleo leve, o sistema teve sua composição paulatinamente modificada, do *blend* com maior percentual de óleo leve, passando pela configuração de *blend* 50% leve, 50% pesado, até a configuração com petróleo pesado.

Para todas as configurações, buscou-se manter as especificações de projeto da coluna. Na Tabela 3.2, pode-se observar as especificações de projeto aplicadas neste trabalho para a coluna atmosférica. Nesta tabela, seguiram-se as recomendações propostas por Watkins(1973), que foram aplicadas de acordo com a configuração dos produtos a serem obtidos pela destilação atmosférica. O campo "Especificações forno da alimentação"

refere-se as entradas para se especificar o forno a fim de que este promova o aquecimento necessário e forneça a pressão necessária (mediante uma bomba na entrada do forno) para a entrada do petróleo no estágio de alimentação (estágio 29), bem como forneça a taxa de sobrevaporizado especificada (3% do volume da alimentação). Com estas especificações, são dadas as condições de operações iniciais do forno, na tabela 3.3.

Especificações de Projeto – Destilação atmosférica					
Número de estágios	34				
Tipo de condensador	Total				
Pressão estágio de topo	1 atm				
Queda de pressão por estágio	0,01173206 atm				
Carga térmica condensador	-110 MW				
Número de colunas auxiliares	3				
Número de estágios – colunas auxiliares	4				
Localização de correntes de retirada e re	etorno de produto (estágios)				
Nafta	1				
Querosene (retirada)	9				
Querosene (retorno)	8				
Diesel (retirada)	16				
Diesel (retorno)	15				
Gasóleo atmosférico (retirada)	25				
Gasóleo atmosférico (retorno)	26				
Localização correntes de alimentação					
Saída do forno	29				
Vapor de esgotamento	34				
Resíduo atmosférico	34				
Especificações forno da alimentação					
Temperatura da alimentação do forno	200°C				
Fluxo alimentação forno	795 m³/h				
Pressão da alimentação ao forno	1 atm				
Temperatura de saída do forno	370°C				
Pressão da zona de expansão	2,04 atm				

Tabela 3.2- Especificações de projeto

Com respeito às configurações operacionais (fluxos de vapor de esgotamento, e fluxos de produtos), o presente trabalho partiu de uma configuração inicial, admitindo-se valores que garantiriam uma situação de convergência inicial para a simulação; estas configurações foram modificadas a fim de que fossem atendidas as especificações dos produtos. As configurações operacionais iniciais são apresentadas na Tabela 3.3, e dizem respeito principalmente às condições do forno e às condições do vapor de esgotamento. Já a Tabela 3.4 apresenta os valores iniciais para os fluxos de saída de produtos de fundo das colunas auxiliares, bem como os fluxos das correntes de vapor de esgotamento utilizadas. O cálculo dos valores baseou-se nas curvas de ponto de ebulição verdadeiro (curvas PEV)

calculadas para cada um dos casos (petróleo leve, *blend*, e petróleo pesado) e o fluxo de vapor de esgotamento a partir de recomendações da literatura (Watkins, 1973). Como realizado no caso das especificações de projeto, as configurações operacionais iniciais foram mantidas para todas as configurações de alimentação consideradas neste trabalho.

Tabela 3.3 - Configurações operacionais iniciais - forno aquecimento.

Configurações operacionais						
Pressão do fluido no forno	3 atm					
Taxa de sobrevaporizado	3% (base volume)					
Condições operacionais – Vapor de esgotamento						
Pressão	4,432 atm					
Tomporatura	260°C					

Tabela 3.4. – Configuração inicial dos fluxos de produto e vapor de esgotamento.

Tipo petróleo	Leve	Blend	Pesado
Nafta	238,5 m³/h	143,1 m³/h	58,5 m³/h
Querosene	135,15 m³/h	95,4 m³/h	87,5 m³/h
Diesel	79,50 m³/h	95,4 m³/h	107,25 m³/h
Gasóleo Atmosférico	135,15 m³/h	119,25 m³/h	117,0 m³/h
Total de produtos destilados	588,00 m³/h	453,15 m³/h	370,25 m³/h
Resíduo Atmosférico	206,70 m³/h	521,85 m³/h	604,75 m³/h
Vapor esgotamento -			
Coluna principal	12686 kg/h	11548 kg/h	19000 kg/h
Coluna auxiliar – Querosene	3850 kg/h	3338 kg/h	2496 kg/h
Coluna auxiliar – Diesel	2267 kg/h	3616 kg/h	3060 kg/h
Coluna auxiliar - Gasóleo	3851 kg/h	4172 kg/h	3337 kg/h

As configurações operacionais iniciais foram, mediante as simulações, modificadas em configurações operacionais finais, de modo que atendessem às especificações dos produtos que foram considerados por este trabalho. Os produtos considerados, bem como as especificações adotadas, são apresentados na Tabela 3.5.

Produto	Especificação
Nafta	D86 95% recuperado = 182 °C
Querosene	D86 95% recuperado = 271 °C
Diesel	D86 95% recuperado = 327 °C
Gasóleo atmosférico	D86 95% recuperado = 377-410 °C
Gap Querosene – Nafta	Gap (5-95) ≥16.7 °C
Gap Diesel – Querosene	Gap (5-95) ≥ 0 °C
Gap Gasóleo - Diesel	$Gap (5-95) = -5.6^{\circ} C a 11^{\circ} C$

Tabela 3.5 – Especificações de produto para coluna atmosférica.

Com isso, tem-se nas Figuras 3.2, 3.3 e 3.4 as frações de produto iniciais, baseados nas PEV's calculadas a partir dos resultados adotados para as configurações adotadas. Destas frações, têm-se os fluxos iniciais de produtos, conforme apresentado na Tabela 3.4.



Figura 3.2 – Frações de produtos destilados – alimentação com petróleo leve.



Figura 3.3 – Frações de produtos destilados – alimentação com *blend*.



Figura 3.4 – Frações de produtos destilados – alimentação com petróleo pesado.

Pelas figuras 3.2, 3.3 e 3.4, pode-se verificar a sensível redução nas frações dos produtos destiláveis da coluna atmosférica. Os produtos destiláveis da coluna atmosférica na configuração com alimentação com petróleo leve tem cerca de 70% de produtos destiláveis, na configuração com alimentação com petróleo pesado não chegam a 40%. As setas nos gráficos das Figuras indicam os pontos de corte para os produtos, base para as configurações iniciais apresentadas.

3.3. Resultados da coluna atmosférica.

Aplicando-se as recomendações e admitindo-se o sistema de acordo com as recomendações adotadas da literatura, procedeu-se com as simulações dos casos considerados. Após atingida a convergência do sistema, pode-se verificar a situação inicial para duas das configurações consideradas nas Figuras 3.5 e 3.6. As setas das Figuras, indicam a temperatura ASTM D86 para 95% de destilado na qual os produtos devem ter para que estejam dentro da especificação.



Figura 3.5 – Situação inicial de configuração, petróleo leve.



Figura 3.6 - Situação inicial de configuração, petróleo pesado.

Como pode ser observado nas Figura 3.5 e 3.6, são apresentadas as curvas ASTM D86 para cada produto do sistema. As setas determinam, para cada produto apresentado, o ponto em que a curva do produto correspondente deve ter 95% do volume destilado a fim de que este produto esteja dentro da especificação. Pode-se observar que os produtos estão

fora de especificação para ambas as configurações apresentadas. Na Figura 3.5, pode-se observar que todos os pontos estão fora de especificação em um produto, ou seja, frações do produto mais leve estão sendo retiradas no produto adjacente. Na Figura 3.6, praticamente todos os produtos estão com parte de suas frações sendo retiradas no resíduo atmosférico: 2% do volume do produto querosene, 21% do volume do diesel e 30% do volume do gasóleo. No caso da nafta, 97% do produto é retirado na corrente do produto querosene, e 97% do querosene é retirado na corrente do produto diesel.

A fim de se adequar os produtos às especificações, um procedimento para ajuste dos fluxos de retirada dos produtos e ajuste dos fluxos de vapor de esgotamento, em colunas auxiliares e na coluna principal foi proposto. Este procedimento contou com a investigação da influência destas variáveis nas especificações dos produtos considerados. Após estas investigações, foram selecionadas variáveis que sofreriam alterações em seus valores, a fim de ajustar os produtos às especificações desejadas.

3.3.1. Resultados da adequação do sistema às especificações de produto.

Nas Tabelas 3.6, 3.7 e 3.8, apresentam-se as variáveis selecionadas como os valores finais, e o resultado do ajuste da especificação.

	Especificação	Produto	Valor	Erro	Variável de ajuste	Valor final
1	Temperatura ASTM D86 95%	Nafta	182°C	$-4,57 \times 10^{-7}$	Carga condensador	-112,22 MW
2	Temperatura ASTM D86 95%	Querosene	271°C	2,15x10 ⁻⁷	Fluxo produto	137,68 m³/h
	_				Querosene	
3	Temperatura ASTM D86 95%	Gasóleo	410°C	5,26 x10 ⁻⁷	Fluxo produto	90,09 m³/h
	_				Diesel	
4	Temperatura ASTM D86 95%	Diesel	327°C	5.15x10 ⁻⁷	Fluxo produto	91,31 m³/h
	-				Gasóleo	
5	Gap ASTM D86 5-95%	Quesonene	≥16,7			31,43°C
	-	Nafta				
6	Gap ASTM D86 5-95%	Diesel	≥ 0			9,85°C
		Querosene				
7	Gap ASTM D86 5-95%	Gasóleo	-5,7 a			4°C
	-	Diesel	11°C			
8	Gap ASTM D86 5-95%	Resíduo				-50
		Gasóleo				

Tabela 3.6 – Resultados da adequação – caso petróleo leve

	Especificação	Produto	Valor	Erro	Variável de ajuste	Valor final
- 1		1 Iouuto	v aloi	E110		
1	Temperatura ASTM D86 95%	Nafta	182°C	7,41x10 ⁻⁷	Carga condensador	-78,90 MW
2	Temperatura ASTM D86 95%	Querosene	271°C	-9,58x10 ⁻⁷	Fluxo produto	88,25 m³/h
	_				Querosene	
3	Temperatura ASTM D86 95%	Gasóleo	410°C	-3.06×10^{-7}	Fluxo produto	87,29 m ³ /h
	1			,	Diesel	,
4	Temperatura ASTM D86 95%	Diesel	327°C	$-1,65 \times 10^{-7}$	Fluxo produto	82,96 m ³ /h
	Ĩ			,	Gasóleo	,
5	Gap ASTM D86 5-95%	Quesonene	\geq 16,7			33°C
	L	Nafta	_ ,			
6	Gap ASTM D86 5-95%	Diesel	≥ 0			14°C
	•	Querosene				
7	Gap ASTM D86 5-95%	Gasóleo	-5,7 a			0°C
	_	Diesel	11°C			
8	Gap ASTM D86 5-95%	Resíduo				-77°C
	_	Gasóleo				

Tabela 3.7 - Resultados adequação - caso blend petróleo

Tabela 3.8 - Resultados adequação - caso petróleo pesado.

	Especificação	Produto	Valor	Erro	Variável de ajuste	Valor final
1	Temperatura ASTM D86 95%	Nafta	182°C	$-4,03 \times 10^{-4}$	Carga condensador	-66,28 MW
2	Temperatura ASTM D86 95%	Querosene	271°C	$2,06 \times 10^{-4}$	Fluxo produto	37,85 m³/h
	_				Querosene	
3	Temperatura ASTM D86 95%	Gasóleo	410°C	$-4,9x10^{-4}$	Fluxo produto	87,01 m³/h
					Diesel	
4	Temperatura ASTM D86 95%	Diesel	327°C	$3,09 \times 10^{-4}$	Fluxo produto	128,08 m ³ /h
	-				Diesel	-
5	Gap ASTM D86 5-95%	Quesonene	≥16,7			34°C
	-	Nafta				
6	Gap ASTM D86 5-95%	Diesel	≥ 0			20°C
	-	Querosene				
7	Gap ASTM D86 5-95%	Gasóleo	-5,7 a			-5,7°C
	_	Diesel	11°C			
8	Gap ASTM D86 5-95%	Resíduo				-20°C
		Gasóleo				

Os resultados obtidos para os produtos apresentaram excelentes ajustes às especificações. Segundo a ordem determinada para a realização das modificações, que foi a mesma adotada para todos os casos (ou configurações) considerados, todos os produtos apresentaram valores acima da especificação mínima requerida. As especificações para os *gaps* entre os produtos não necessitaram de alterações específicas para o cumprimento de suas especificações. No que se refere à especificação para o produto gasóleo, vale a pena salientar que este se refere a uma faixa de valores. O *gap* entre os produto gasóleo e o

resíduo não contou com especificação, visto que o resíduo atmosférico é alimentado novamente à coluna de destilação a vácuo.

3.3.2. Resultados sem reciclos circulantes.

Para fins de comparação dos resultados, realizou-se uma comparação dos resultados obtidos neste trabalho com os resultados da literatura (Ji e Bagajewicz, 2001), tomando por base as configurações para petróleo leve e para petróleo pesado. Nos dois casos, temos as mesmas configurações para coluna atmosférica (Tabela 3.2). Os resultados deste trabalho só puderam ser comparados para a configuração em que se usou petróleo leve, visto que os resultados da literatura (Ji e Bagajewicz, 2001) só foram apresentados para o caso do petróleo leve.

Fluxo Produtos						
Produto	Bagajewicz	Este trabalho				
Nafta(m ³ /h)	250	255,0				
Querosene(m ³ /h)	144	137,6				
Diesel(m ³ /h)	70	90,0				
Gasóleo(m ³ /h)	121	91,3				
Resíduo(m ³ /h)	211	221,0				
Gap (5-95) Querosene - Nafta	25,2°C	31,4°C				
Gap (5-95) Diesel - Querosene	5,1°C	9°C				
Gap (5-95) Gasóleo - Diesel	0,9°C	4°C				
Carga Condensador (MW)	103,8	112,2				
Temperatura Zona de						
Expansão	358,6	363,8				
Razão vapor de esgota	mento (lb/h por bbl/	h de produto)				
Querosene	9,8	10				
Diesel	10,2	10				
Gasóleo	10,1	10				
Resíduo	10,2	10				
Temperatura de prato - Retirada lateral						
Querosene	238,8	214,2				
Diesel	298,7	278,8				
Gasóleo	338,7	323,5				
Resíduo	347,8	361,8				

Tabela 3.9. – Comparação resultados (caso petróleo leve)

Pela Tabela 3.9, verifica-se que a simulação apresentou boa representação, contando-se com os critérios adotados para o atendimento do sistema às especificações de produto. A estratégia adotada apresentou rendimentos levemente inferiores aos apresentados pela literatura para alguns produtos, mas manteve as especificações acima do mínimo requerido, como pode ser visto ao se comparar os *gaps* entre os produtos. Fatores que podem indicar esta diferença residem no sistema utilizado na literatura citada para a

característica do vapor utilizado (temperatura, pressão e razão de fluxo de alimentação, onde o autor apresenta dois valores: um valor baseado nos produtos, e outro baseado na alimentação) bem como perfis de pressão, tanto para o forno quanto para a coluna, não citados. O ajuste apontado para literatura para as razões de vapor de esgotamento também indicam fontes de diferença, apesar de que o estudo realizado para essas variáveis não ter apresentado influência significativa nos rendimentos dos produtos.

3.3.3. Implantação e resultados com reciclos circulantes.

Com a comparação dos resultados, deve-se completar a configuração para coluna atmosférica com a implantação de equipamentos como reciclos circulantes. A configuração da coluna de destilação atmosférica, com a implantação dos reciclos circulantes é apresentada na Figura 3.7, com os reciclos circulantes dispostos à esquerda da coluna principal e as colunas auxiliares de retirada dos produtos à direita.



Figura 3.7 – Esquema de destilação atmosférica (com reciclos circulantes).

A etapa de inserção dos reciclos circulantes realizou-se de modo a ter-se a comparação com resultados da literatura para sistema semelhante (Ji e Bagajewicz, 2001). A implantação dos reciclos circulantes seguiu uma seqüência definida, de acordo com os seguintes critérios:

- Adotou-se que seriam implantados em cada um dos casos 3 reciclos circulantes. Estes foram implantados em seções adjacentes aos pratos de retirada e retorno das colunas auxiliares.
- Fez-se a implantação de modo seqüencial, começando pelo reciclo circulante entre a retirada de nafta e o retorno de querosene;
- Especificou-se para os reciclos circulantes a temperatura de retorno, que foi a mesma temperatura do prato em que o reciclo circulante retorna o fluxo, no momento de sua instalação;
- A retirada realizada no reciclo circulante foi de caráter parcial, o que define o equipamento com duas especificações. Adotaram-se temperatura de retorno e carga térmica como especificações;
- A cada implantação, alterou-se a configuração da carga térmica até o limite máximo de convergência;
- Verificou-se a redução da carga térmica total para todos os casos aqui considerados.

Baseando-se nestes critérios, foram obtidos os resultados comparativos entre a configuração sem reciclos circulantes, apresentados nas Tabelas 3.10, 3.12 e 3.14. A comparação do consumo de carga térmica é apresentada nas Tabelas 3.11, 3.13 e 3.15 para o petróleo leve, o *blend* e o petróleo pesado, respectivamente.

Com 3 reciclos circulantes			Sem reciclos circulantes				
Produto	Temperatura Retirada °C	Temperatura saída °C	Vazão m³/h	Produto	Temperatura retirada °C	Temperatura saída °C	Vazão m³/h
Nafta	27,8	-	250	Nafta	28,1	-	255
Querosene	199,7	173,2	136,5	Querosene	214,2	180,9	137,7
Diesel	272,2	243,2	94,7	Diesel	278,8	247,9	90,1
Gasóleo	323,1	298,9	92,1	Gasóleo	323,5	299,4	91,3
Alimentação	363,8	-	975	Alimentação	363,8	-	975
Resíduo	361,8	-	220,8	Resíduo	361,8	-	221

Tabela 3.10 – Resultados do sistema com reciclos circulantes – petróleo leve.

Tabela 3.11 – Comparação entre cargas térmicas do sistema – petróleo leve.

Configuração com reciclos circulantes						
	Condensador	Reciclo circulante	Reciclo circulante	Reciclo circulante		
		1	2	3		
Posição retirada líquido	-	4	12	19		
Posição retorno líquido	1	2	10	17		
Temperatura de retorno, °C	27,8	104,4	171	232,2		
Carga térmica, MW	47,9	22,3	33,7	8,8		
Carga térmica total, MW	112,7					
Configuração sem reciclos circulantes (apenas condensador)						
Temperatura de retorno, °C	28,3					
Carga térmica total, MW	112,2					

Com 3 reciclos circulantes			Sem reciclos circulantes				
Produto	Temperatura Retirada °C	Temperatura saída °C	Vazão m³/h	Produto	Temperatura retirada °C	Temperatura saída °C	Vazão m³/h
Nafta	32,1	-	162,0	Nafta	32,3	-	163,0
Querosene	207,8	177,0	87,0	Querosene	215,0	181,5	88,2
Diesel	277,9	248,4	88,9	Diesel	283,0	251,7	87,3
Gasóleo	322,5	295,8	83,9	Gasóleo	323,0	296,4	82,9
Alimentação	366,5	-	975,0	Alimentação	366,2	-	975
Resíduo	361,8	-	372,7	Resíduo	361,8	-	553,3

Tabela 3.12 – Resultados do sistema com reciclos circulantes – *blend* petróleo.

Tabela 3.13 – Comparação entre cargas térmicas do sistema – *blend* petróleo.

Configuração com reciclos circulantes						
	Condensador	Reciclo circulante 1	Reciclo circulante 2	Reciclo circulante 3		
Posição retirada líquido	-	4	12	19		
Posição retorno líquido	1	2	10	17		
Temperatura de retorno, °C	32,1	134,0	145,0	248,0		
Carga térmica, MW	41,9	19,7	10,4	7,0		
Carga térmica total, MW	72,1					
Configuração sem reciclos circulantes (apenas condensador)						
Temperatura de retorno, °C	32,3					
Carga térmica total, MW	78,9					

Com 3 reciclos circulantes			Sem reciclos circulantes				
Produto	Temperatura Retirada °C	Temperatura saída °C	Vazão m³/h	Produto	Temperatura retirada °C	Temperatura saída °C	Vazão m³/h
Nafta	47,5	-	61,8	Nafta	52,1	-	63,5
Querosene	199,1	175,0	31,8	Querosene	217,3	183,0	34,8
Diesel	276,1	248,3	66,1	Diesel	289,0	255,0	63,6
Gasóleo	322,7	290,7	71,3	Gasóleo	322,9	290,0	69,1
Alimentação	367,8	-	975,0	Alimentação	367,7	-	975,0
Resíduo	366,7	-	563,0	Resíduo	366,6	-	564,0

Tabela 3.14 – Resultados do sistema com reciclos circulantes – petróleo pesado.

Tabela 3.15 – Comparação entre cargas térmicas do sistema – petróleo pesado.

Configuração com reciclos circulantes							
	Condensador	Reciclo circulante 1	Reciclo circulante 2	Reciclo circulante 3			
Posição retirada líquido	-	4	12	19			
Posição retorno líquido	1	2	10	17			
Temperatura de retorno, °C	47,5	131,0	139,0	246,0			
Carga térmica, MW	17,2	3,5	9,3	9,3			
Carga térmica total, MW	39,3						
Configuração sem reciclos circulantes (apenas condensador)							
Temperatura de retorno, °C	52,1						
Carga térmica total, MW	39,2						

A adição de reciclos circulantes promoveu uma baixa redução nos rendimentos dos produtos considerados, com leves aumentos em alguns casos. Em geral, a redução na carga térmica foi mais notória no caso do *blend* de petróleo, onde a configuração adotada levou a uma situação mais otimizada do ponto de vista energético. Uma melhor comparação sobre o efeito dos reciclos circulantes está apresentada nas Figuras 3.8 e 3.9, onde apresentam-se perfís de temperatura para o petróleo leve e o pesado, para as simulações com e sem reciclos circulantes. As linhas verticais nos estágios 2,4,10,12,17 e 19, indicam posições de retirada e retorno dos reciclos circulantes. Na legenda, RC indica "reciclos circulantes".



Figura 3.8 – Perfil de temperatura (com reciclos circulantes) – petróleo leve.



Figura 3.9 – Perfil de temperatura (com reciclos circulantes) – petróleo pesado.

Pelas Figuras 3.8 e 3.9, verifica-se a redução da temperatura causada pelos reciclos circulantes. Verifica-se que a redução no perfil de temperatura com a adição dos reciclos circulantes foi mais pronunciada na coluna com petróleo pesado, apesar de a carga térmica total ter sido inferior à carga da coluna com petróleo leve. As maiores reduções ocorreram nos reciclos superiores, não implicando em grande redução de rendimento de produto, indicando potenciais pontos para integração energética.

3.4. - Conclusão

A implementação da coluna de destilação atmosférica foi implementada satisfatoriamente. Realizou-se descrições a respeito dos métodos de cálculos termodinâmicos, bem como acerca das configurações adotadas de modo a garantir a reprodutibilidade dos resultados. O procedimento adotado para ajuste de variáveis operacionais para que se fosse atingida a especificação dos produtos mostrou-se bastante eficiente. A comparação dos resultados obtidos neste trabalho apresentou boa reprodução dos resultados obtidos da literatura, com ressalvas às informações não disponibilizadas. A configuração com reciclos circulantes não implicou em melhora no rendimento dos produtos, mas apresentou modificação nos perfis de temperatura para os dois casos apresentados. Em ambos os casos estudados, a redução foi mais pronunciada nos trechos de retirada de produtos leves e intermediários. Os resultados indicaram potenciais para estudo posterior visando integração energética.

Capítulo 4 - Destilação a Vácuo

Este capítulo destina-se a apresentar aspectos da destilação a vácuo, seus usos, e apresentação de um procedimento para a implementação da coluna de destilação a vácuo. Uma breve revisão da literatura é apresentada, destacando os trabalhos mais relevantes no desenvolvimento da técnica. Na seqüência, discute-se a respeito dos resultados oriundos desta implementação, que servem de ponto de partida para procedimentos de otimização do sistema.

Para a implementação da coluna a vácuo, usam-se as simulações e os resultados apresentados para a destilação atmosférica. Aqui, parte-se das configurações de alimentação definidas para o estudo da destilação atmosférica (petróleo leve, *blend*, e petróleo pesado), com a situação em que os três reciclos circulantes estão instalados (configuração convencional completa).

Na implementação da coluna a vácuo, partiu-se de uma configuração simplificada, para uma configuração mais realística ao funcionamento. Partindo-se de cada caso, desenvolveu-se uma estratégia única para a implementação da configuração e apresentou-se a configuração inicial para a qual a convergência completa da coluna foi alcançada. A situação inicial é descrita para cada configuração de alimentação em estudo, fazendo-se considerações acerca dos objetivos a serem alcançados para as etapas de otimização, dimensionamento e simulação dinâmica.

4.1. Destilação a Vácuo - Descrição do processo.

O processo de destilação a vácuo é destinado à recuperação de frações utilizáveis do resíduo atmosférico, por destilação a baixas pressões. A destilação a baixa pressão reduz a pressão de vapor, e consequentemente a temperatura de ebulição dos componentes presentes no resíduo atmosférico, permitindo que possam ser fracionados. O uso do vácuo serve também para reduzir a decomposição térmica. A Figura 4.1 apresenta um exemplo de destilação a vácuo.



Figura 4.1 – Descrição do processo de destilação a vácuo(Golden et al,1994).

A destilação a vácuo pode atender a dois tipos básicos de configuração: atender as características do resíduo atmosférico, e atender as demandas de mercado que definem as características dos produtos a serem destilados. Assim, tem-se a configuração de coluna de destilação a vácuo para base de combustíveis e configuração de destilação a vácuo para base de lubrificantes. A configuração de destilação a vácuo para base de lubrificantes visa a produção de lubrificantes. Nesta configuração, as especificações de produtos são mais rigorosas, e, como no caso da destilação atmosférica, faz-se uso de colunas auxiliares de esgotamento dos produtos, a fim de se atender às especificações dos produtos a serem obtidos da unidade.

A configuração de destilação a vácuo para base de combustíveis visa a obtenção de destilados na faixa do combustível gasóleo. Devido às demandas do mercado por combustíveis leves, os produtos oriundos da destilação a vácuo, que variam de diesel a gasóleo pesado, são processados em unidades de craqueamento catalítico, a fim de que se aumentem os rendimentos dos combustíveis leves na planta de refino como um todo.

O resíduo da coluna de destilação a vácuo pode ser encaminhado para unidades de coqueamento (processo térmico onde acontece a conversão do resíduo em frações na faixa do diesel e do querosene, gerando coque como resíduo), unidades de craqueamento térmico (processo no qual componentes de alto ponto de ebulição são transformados em
componentes de baixo ponto de ebulição) ou ainda em unidades de desasfaltização (convertendo o resíduo em frações na faixa do gasóleo pesado e gerando asfalto residual).

Em ambos os tipos de configurações de destilação a vácuo, o resíduo atmosférico é reaquecido em um forno, até a temperatura limite de craqueamento térmico, a fim de que se evite a decomposição do resíduo. Este resíduo é, então, alimentado à coluna de destilação a vácuo em uma região denominada zona de expansão. O óleo sofre uma vaporização, devido à diferença de pressão existente entre a linha de transmissão e a zona de expansão. A zona de expansão tem pressão absoluta típica em torno de 100mmHg. A fração vaporizada ascende à zona de expansão, onde entra em contato com líquido sobrevaporizado, em uma região denominada zona de lavagem. O sobrevaporizado nesta unidade corresponde de 1 a 3% do volume de óleo vaporizado na zona de expansão. A função da zona de lavagem é a redução de componentes na faixa do resíduo de vácuo nos produtos destilados da unidade.

O líquido saído da zona de lavagem atravessa seções de pratos em direção ao fundo da coluna. Como o resíduo tem um percentual relativamente alto de compostos na faixa dos produtos, este é esgotado à medida que atravessa os pratos na seção inferior a zona de expansão por injeção de vapor de esgotamento no fundo da coluna de destilação.

O vapor saído da zona de lavagem atravessa seções de condensação de equilíbrio; essas seções podem ser constituídas por recheio ou pratos, sendo atualmente constituídas majoritariamente por recheios. Nas seções de condensação por equilíbrio, todo o líquido que atravessa o recheio é retirado por saídas laterais totais de líquido, em pratos que permitem apenas o fluxo de vapor ascendente por eles. O produto retirado das seções é resfriado e parte dele é realimentado no topo do recheio da seção. Esta realimentação provê o líquido descendente do recheio, garantindo a retificação da fração do vapor que segue para a seção superior.

Normalmente, para este tipo de configuração, tem-se dois ou três produtos. Para cada produto retirado da coluna, tem-se uma seção de condensação de equilíbrio, constituída por prato panela, reciclo circulante e recheio. As configurações ainda contam com eliminadores de névoa acima da seção de alimentação do recheio. O topo da coluna de destilação a vácuo compõe-se, basicamente, por um eliminador de névoa, a fim de se eliminar presença de partículas de líquido na seção de geração de vácuo. Geralmente, essa

fração de vapor é denominada por gasóleo residual, com quantidades desprezíveis em relação aos produtos destilados e ao resíduo de vácuo.

A coluna de destilação a vácuo para base de combustível não necessita de instalação de colunas auxiliares para retificação dos produtos, visto que as especificações dos produtos são menos rigorosas do que as especificações da configuração para base de lubrificantes e foi a configuração adotada no presente trabalho.

4.1.1. Revisão da literatura

Dentre os trabalhos pioneiros acerca da destilação a vácuo, destaca-se o trabalho de Kraft (1948), onde sumarizou os aspectos principais da técnica, destacando o período de sua expansão, que se deu principalmente devido ao aumento da demanda por óleos lubrificantes. Traçou aspectos das unidades de destilação a vácuo mais simples, com aspectos da alimentação para o serviço ao qual o projeto se destinava (produção de material de base para produção de lubrificantes, e base para unidades de craqueamento catalítico), apresentando conceitos para o projeto destes equipamentos, com detalhamento dos equipamentos e seus acessórios, tal como fornos, configurações internas de coluna e aspectos do projeto dos pratos coletores. A sua análise teve foco principal no modo de operação com injeção de vapor para fins de esgotamento do resíduo, a fim de que se fossem atingidas as especificações dos produtos considerados. Ele conclui com sua análise sobre o uso das colunas na operação de vácuo a vapor estabelecendo que o limite para a pressão limite de operação na coluna sendo determinada principalmente pela temperatura da água de resfriamento e os modos pelo qual o vapor é condensado. Conclui ainda que a temperatura da zona de expansão é governada tanto pela natureza do óleo a ser processado quanto pelas características necessárias aos produtos, fatores que devem ser combinados para se estabelecer a quantidade de vapor para o efeito da pressão parcial.

Nelson (1969) em seu trabalho, afirma o caráter primordial da diferença entre as principais configurações na qual a coluna a vácuo é usada, justificando as diferentes configurações baseado nos requisitos que os produtos devem cumprir em cada uma delas, e refinando os conceitos acerca do equipamento de destilação a vácuo. A produção de destilados, tanto os para uso direto como combustíveis quanto os que são alimentados em

outras unidades para posterior processamento, não requerem qualquer grau de fracionamento específico entre os cortes. Devido a isso, os destilados podem ser condensados por refluxos circulantes de resfriamento, seções de contato (recheios), ou pratos de campânula. Afirma ainda, que as operações das seções principais de condensação podem ser descritas por um estágio único de condensação.

Watkins (1973) apresenta em seu trabalho procedimentos para destilações diversas para refino de petróleo, englobando as principais operações de destilação em uma refinaria, apresentando alternativas de configurações para as diversas torres, e sugere um método para o projeto de colunas atmosféricas e colunas a vácuo. Tal método apresenta procedimentos e cálculos para o projeto das colunas de uma refinaria, englobando desde unidades de destilação atmosférica a unidades de separação de produtos de craqueamento catalítico.

Mais recentemente, trabalhos levantaram questões operacionais, tais como otimização de rendimentos de produtos e aspectos referentes à caracterização. Golden et al. (1994) destaca aspectos da caracterização da alimentação e limite de separação entre os produtos, analisando o impacto da destilação simulada de alta temperatura (HSTD), conjuntamente com outros métodos de caracterização, apontando problemas oriundos de representatividade em vários métodos de caracterização tradicionais e aspectos operacionais nos equipamentos de destilação a serem considerados para a caracterização. Conclui que projetos de reengenharia em unidades de vácuo apresentam uma curta história de operação, e que uma caracterização que garanta boa representatividade permite um dimensionamento correto para rendimentos de gasóleo, cálculos de sobrevaporizados e taxas de óleo de lavagem, melhorando a rentabilidade da planta como um todo. Kister et al. (1996) apresenta procedimentos para melhoria das torres de destilação a vácuo, enfocando aspectos operacionais através do estabelecimento de uma coluna a vácuo com equipamentos de controle e, por meio disso, descreve casos-chave para melhoria do desempenho das torres. Golden (1998) apresenta aspectos-chave para o projeto do equipamento de destilação a vácuo com foco na redução da formação de coque e maximização do rendimento do gasóleo de colunas a vácuo, destacando aspectos que afetam o rendimento na produção de gasóleo, bem como aspectos de performance dos equipamentos enfocando modos de se minimizar a formação de coque, apresentando suas recomendações nestes aspectos.

53

Com enfoque maior em ações de reengenharia, os trabalhos de Martin e Cheatham (1999) e Martin (2002) apresentam enfoques visando reduções em tempos para melhoria em rendimentos de produtos e comparam enfoques de projeto. Em seu trabalho, Martin e Cheatham (1999) focalizam problemas típicos de baixo desempenho, estabelecendo procedimentos para identificações e análises de restrições, para em seguida traçar duas formas de projeto para se realizar ações de reengenharia, realizando uma comparação entre ambas. Martin (2002) destaca em seu trabalho a importância de se conhecer o desempenho dos equipamentos conectados a fim de se melhorar o desempenho da unidade, apresentando um relato das variáveis críticas do processo, aspectos de integração de projeto de equipamentos, podendo levar ao aumento da produção de gasóleo e a melhoria da qualidade do produto.

No estudo de simulações envolvendo destilação de petróleo, destaque especial deve ser dado à série de trabalhos conduzidos por Bagajewicz (1998) e Ji e Bagajewicz (2001, 2002). Em seu primeiro trabalho sobre o tema, apresenta um estudo acerca da flexibilidade das unidades de fracionamento atmosféricas, englobando em seu estudo a investigação de variáveis, tais como retirada de carga térmica por reciclos circulantes, efeito de correntes de vapor em colunas auxiliares de esgotamento, efeito de sobrevaporizados e uso de refervedores. Em seguida, faz um estudo de unidades de fracionamento atmosféricas do ponto de vista energético (Ji e Bagajewicz, 2001) e estende a análise para colunas a vácuo, analisando casos com mudanças no tipo de petróleo usado (Ji e Bagajewicz, 2002).

Trabalhos focados em estudos de caso tais como os de Faranda et al (2002) e Hanson e Martin (2002) buscam melhoria de processos em plantas reais. Faranda et al (2002) propuseram um sistema de sensores de controle distribuído embasado em redes neurais, destacando possibilidades de sistemas inferenciais para predição de propriedades de variáveis de processo de difícil medição, aplicando em uma unidade de destilação a vácuo, na predição da penetração de correntes de resíduo em refinarias, concluindo ser uma técnica promissora para a medição da penetração do asfalto. Hanson e Martin (2002) focaram ações de reengenharia em uma planta real como estudo de caso. O estudo levou em conta a situação atual, a identificação de fatores-chave para as ações, bem como os objetivos de melhoria, e condições operacionais, atingindo ao fim do processo melhorias com reduções de resíduo de 6% do volume de petróleo processado. Estudos enfocando internos de coluna a vácuo são encontrados em trabalhos como os de Lebedev et al (2004) e Ratovskii et al (2004). Lebedev et al (2004) realizaram um estudo comparativo entre recheios estruturados, para torres de produção de base de combustíveis e base para lubrificantes, concluindo que o recheio estruturado VAKUPAK é comparativamente mais efetivo e confiável. Ratovskii et al (2004) realizaram estudos comparativos no que se refere a rendimento de produtos, com os recheios KEDR e VAKUPAK, concluindo que estes recheios estruturados oferecem eficiência análoga em relação a outros recheios aplicados.

4.2. Implementação da simulação da coluna a vácuo.

Para a implementação da coluna de destilação a vácuo, partiu-se da configuração tradicional, de modo simplificado, como pode ser visto na Figura 4.2:



Figura 4.2 - Configuração simplificada de destilação a vácuo.

A configuração apresentada na Figura 4.2 foi denominada por configuração simplificada, pelo fato desta coluna não apresentar algumas características típicas de uma coluna de destilação convencional. A coluna de destilação a vácuo pode ser melhor compreendida como uma sucessão de seções de esgotamento e de retificação. De acordo com a Figura 4.2, pode-se entender a coluna de destilação a vácuo da seguinte forma:

 Abaixo da entrada da alimentação (saída do forno) tem-se uma seção de esgotamento do líquido descendente da zona de expansão (fração não vaporizada a partir da zona de expansão) que ocorre por meio de injeção de vapor de esgotamento no fundo da coluna. O líquido descendente é esgotado pelo vapor à medida que passa por pratos, até ser retirado do fundo da coluna, constituindo no resíduo de vácuo (RV);

- A partir da entrada da alimentação do forno, tem-se uma seção denominada zona de expansão, que é geralmente encarada como uma seção de *flash* de equilíbrio. Na zona de expansão, tem-se a separação entre a fração vaporizada e a fração não vaporizada da alimentação. A fração vaporizada contém em sua faixa de ebulição todos os produtos destiláveis.
- Acima da zona de expansão tem-se a região denominada por zona de lavagem, que é constituída por uma seção onde o vapor ascendente da zona de expansão entra em contato com o líquido descendente (sobrevaporizado), por meio de recheios.
- Uma região de condensação parcial, seção situada entre a retirada e o retorno do produto gasóleo pesado (GOP) e composta por eliminador de névoa (*demister*) acima do recheio, sistema de distribuição de líquido, seqüência de pratos ou recheios, e prato coletor de líquido (retirada total).
- Uma segunda região de condensação parcial no topo da coluna, situada entre a retirada e o retorno do produto gasóleo leve (GOL), e composta de eliminador de névoa (*demister*), sistema de distribuição de líquido, seqüência de pratos ou recheios, e prato coletor de líquido (retirada total).
- Uma última região que se comunica com o sistema de geração de vácuo para a coluna como um todo, onde se condensam frações de óleo remanescentes, denominadas por gasóleo residual (GORT), com quantidade desprezível em relação aos outros produtos destilados (GOL e GOP).

Desta forma, a melhor alternativa, e a mais condizente com as características do processo, foi a de realizar a implementação da coluna a vácuo por estágios. Nesta implementação, a coluna foi desmembrada em 3 colunas distintas, sendo estas denominadas por estágios. Estes estágios foram implementados no simulador de forma seqüencial, e organizados da seguinte forma:

- 1º Estágio Seção de esgotamento do líquido da zona de expansão e zona de *flash* (sem eliminador de névoa, ou recheio com óleo de lavagem);
- 2º Estágio Retorno do líquido de lavagem (com temperatura reduzida em trocador de calor), circuito de reciclo inferior, retirada de gasóleo pesado (GOP), prato de barreira contra líquido de arraste.
- 3º Estágio Circuito de reciclo inferior, retirada de gasóleo leve (GOL), saída de gasóleo residual de topo (GORT – na simulação, denominado OFFGAS). As condições do 3º estágio são monitoradas, a fim de que o fluxo de GORT seja desprezível.

Apesar do fato dos eliminadores de névoa existirem na configuração de várias colunas em operação, principalmente no topo de colunas, o fato de funcionarem pelo princípio do impacto inercial das partículas do líquido (névoas) contra conjuntos de lâminas paralelas faz com que a modelagem dessa parte do equipamento seja de grande dificuldade; buscou-se incluir os eliminadores aproximando-os por seção de recheios, o que apresentou dificuldades computacionais, para uma ínfima melhora na qualidade do vapor. Devido a isso, os eliminadores foram desconsiderados da simulação.

A implementação a coluna de destilação a vácuo segundo a organização descrita é apresentada na Figura 4.3:



Figura 4.3. – Coluna de destilação a vácuo – ambiente de simulação.

Pela Figura 4.3. o primeiro estágio está representado por CDV-1, o estágio de retirada de Gasóleo Pesado (na Figura HVGO), e retorno de sobrevaporizado (na Figura, ROVER) por CDV-2. O estágio de retirada de Gasóleo Leve (na Figura LVGO), por CDV-3. As correntes de gasóleo residual e resíduo de vácuo, são representadas por OFFGAS E VACRES, respectivamente. A corrente de vapor de esgotamento é a segunda corrente de alimentação no primeiro estágio (abaixo da alimentação, denominada por VACFEED), e as correntes de fluido frio dos trocadores de calor (HE-CDV2 e HE-CDV3), são as correntes inferiores em cada um dos trocadores de calor. O reciclo de cada estágio é determinado através de válvulas *spliter* (SPT1 para 3º estágio, e SPT2 para 2º estágio). As correntes em pontilhado são denominadas por pseudocorrentes. As pseudocorrentes constituem em correntes de medição, a fim de se avaliar fluxos em setores de coluna, não influenciando diretamente nos resultados e cálculos do processo.

Baseando-se nos estudos das variáveis do processo e das especificações para os produtos da coluna a vácuo adotada, uma série de análises de sensitividade foram realizadas. Com estes resultados, apresentam-se alternativas para o procedimento de otimização. A segunda corrente de topo do 3º estágio foi adicionada como corrente de água líquida do processo. Apesar desta corrente não influenciar no resultado do processo, tal inserção se fez necessária para melhoria da estabilidade do sistema: devido ao método de solubilidade escolhido no pacote termodinâmico (método de água livre), a corrente é necessária por se considerar saída de água líquida nas equações, apesar de não estar presente na corrente (o seu valor é sempre zero).

4.3. Inserção dos estágios da coluna a vácuo.

Na primeira etapa da implementação do sistema, o 1º estágio foi instalado, considerando um condensador no topo. Adotou-se tal procedimento, devido ao fato de que a alimentação do líquido no topo da coluna referente ao 1º estágio ser proveniente do 2º estágio. Após atingida a convergência do sistema, o condensador do 1º estágio foi ajustado para retornar a quantidade de líquido referente ao percentual de líquido sobrevaporizado (ou seja, um condensador parcial que condensa algo como 2% do fluxo de vapor no topo da coluna). Uma esquema do processo é apresentado na Figura 4.4:



Figura 4.4. – Instalação do primeiro estágio – coluna a vácuo.

Na Figura, observa-se o valor da carga do condensador (QC), já ajustado segundo o fluxo desejado de líquido sobrevaporizado. As correntes em cinza representam a estratégia para este ajuste. As correntes OVER e V-ZE representam o fluxo de vapor na zona de expansão, e o fluxo de líquido descendente do topo da coluna. Especificou-se a carga do condensador de tal forma que o fluxo de líquido da corrente OVER fosse igual a 2% do fluxo volumétrico da corrente V-ZE. Feito isso, procedeu-se à inserção do segundo estágio.

O segundo estágio também foi inserido inicialmente com um condensador. Neste caso, o condensador foi regulado para condensar um fluxo próximo de 60% do fluxo de vapor no topo da coluna. O retorno foi sucessivamente ajustado para retornar o fluxo de líquido pelo condensador até a retirada do condensador do sistema. A instalação do segundo estágio é apresentada na Figura 4.5.



Figura 4.5. – Instalação do segundo estágio – coluna a vácuo.

A vazão de água de refrigeração do trocador de calor foi ajustada para garantir a temperatura desejada de saída, que inicialmente foi ajustada para 82°C. O procedimento seguinte foi a ligação da corrente de retorno de sobrevaporizado ao primeiro estágio. Isso foi realizado, primeiramente, com uma especificação em que a válvula que regula a fração de produto na corrente ROVER (SPT2) fosse igual ao fluxo da corrente OVER. Após se satisfazer esta especificação, ela foi desativada, o reciclo foi ligado, e o condensador do 1º estágio retirado. A partir desse ponto, a corrente ROVER foi especificada de forma semelhante à corrente OVER, mas com o fluxo de sobrevaporizado sendo regulado pela válvula SPT2. O procedimento para a inserção do 3º estágio foi semelhante ao procedimento para a inserção do 2º estágio.

4.4. Considerações a respeito dos resultados para coluna atmosférica

Na implementação da coluna de destilação a vácuo, considerou-se os casos estudados para coluna atmosférica. As simulações da coluna a vácuo foram realizadas considerando-se as três configurações de alimentação adotadas, todas com os reciclos circulantes da forma apresentada no capítulo anterior.

Dos resultados obtidos para a coluna atmosférica, estimaram-se as frações de produto inicial. As frações foram determinadas de acordo com as especificações para os produtos considerados na configuração de coluna a vácuo. (Tabela 4.1)

Produto	Especificação		
Gasóleo Leve (GOL)	Mínima	ASTM D86 95% = 377°C	
Gasoleo Leve (GOL)	Máxima	ASTM D86 95% = 410°C	
Gasálao Pasado (GOP)	Mínima*	60% dos destilados GORT, GOL E GOP (GOL D86 95% recuperado= 377°C)	
Gasoleo resado (GOP)	Máxima*	60% dos destilados GORT, GOL E GOP (GOL D86 95% recuperado= 410°C)	

Tabela 4.1 – Especificações de produto

* Em geral a fração de GORT é desconsiderada nas especificações de GOP, por seu volume reduzido.

As especificações para o gasóleo leve são as mesmas adotadas para o gasóleo atmosférico, por constituírem na fração pertencente a este corte pelo *overlap* (gap negativo entre cortes adjacentes) entre o resíduo atmosférico e o produto em questão. Para o gasóleo residual (GORT), esperam-se frações próximas à especificação do Diesel. Como o fluxo deste produto é bastante pequeno, geralmente desconsidera-se este para as especificações do gasóleo pesado, que se constitui em 60% do fluxo de destilado (majoritariamente composto por GOL e GOP). As Figuras 4.4, 4.5, e 4.6 apresentam a distribuição dos produtos, segundo a configuração de alimentação adotada.



Figura 4.6 – Distribuição de produtos – resíduo atmosférico – petróleo leve.



Figura 4.7 – Distribuição de produtos – resíduo atmosférico – blend petróleo.



Figura 4.8. – Distribuição de produtos – resíduo atmosférico – petróleo pesado.

Pelas Figuras 4.6, 4.7 e 4.8 pode ser notado que as faixas de especificação dos produtos considerados sofrem variação de acordo com as características do resíduo considerado, fato que justifica a simulação das colunas de destilação atmosférica e de destilação a vácuo de modo conjunto. As faixas de especificação entre os produtos da destilação a vácuo não são independentes, sendo que um valor dentro da especificação para gasóleo leve deve apresentar seu correspondente equivalente para o gasóleo pesado para que esse esteja também dentro da especificação. Outro critério que pode ser adotado na especificação destes produtos é o aproveitamento da similaridade do gasóleo leve com o gasóleo atmosférico, e especificar o gasóleo leve segundo a ASTM D86 95% do gasóleo atmosférico.

4.5. Resultados da simulação da coluna a vácuo.

Segundo as faixas apresentadas para os dois produtos principais da coluna de destilação a vácuo, planejou-se a implantação da coluna. Na Tabela 4.2 são apresentados os resultados iniciais para a configuração de alimentação para petróleo leve com sistema semelhante ao encontrado na literatura (Ji e Bagajewicz, 2002).

	Resultados literatura	Resultados deste trabalho			
Gap (5-95) produtos (°C)					
Nafta-Querosene	16,6	21,64			
Querosene- Diesel	0,0	1,77			
Diesel – Gasóleo	-4,0	-0,6			
GOL-GOP	-30,4	-22,77			
Rendimentos (m ³ /h)					
Nafta	244,39	248,95			
Querosene	144,76	131,57			
Diesel	71,82	91,52			
Gasóleo Atmosférico	124,25	83,84			
GORT	0,202	0,68			
GOL	22,92	33,73			
GOP	81,43	110,00			
Resíduo Vácuo	105,53	94,61			

Tabela 4.2 – Comparação dos resultados – petróleo leve.

Pela Tabela 4.2, pode-se verificar que os resultados obtidos com as aplicações das técnicas para convergência de ambos os sistemas apresentaram boa representatividade para os resultados obtidos da literatura. Os resultados da Tabela 4.2, se comparados com os resultados obtidos no Capítulo 3, mostram que os resultados obtidos para os produtos da destilação atmosférica apresentaram um rendimento (aumento de fluxo volumétrico) consideravelmente maior devido ao maior consumo de carga térmica (condensadores e reciclos circulantes) de um modo geral. Os resultados apresentados para a destilação a vácuo apresentaram um melhor resultado ao serem comparados com os resultados da literatura. A outra configuração de alimentação considerada neste trabalho (petróleo pesado) não pôde ser comparada com valores da literatura, dado a ausência de configuração semelhante na literatura para o sistema a fim de que tal comparação pudesse ser realizada. Novamente aqui, ressalvas devem ser feitas quanto aos métodos de cálculo utilizado, e às características do vapor utilizado para a coluna a vácuo da literatura, pois tais valores não

foram informados. Os resultados da implementação para todos os casos considerados neste trabalho são apresentados na tabela 4.3.

	Petróleo Leve	Blend	Petróleo Pesado		
Gap (5-95) produtos (°C)					
Nafta-Querosene	21,64	21,64 29,8 27,9			
Querosene- Diesel	1,77	14,4	12,2		
Diesel – Gasóleo	-0,6	4,7	-10,1		
GOL-GOP	-22,77	1,5	-18,3		
Rendimentos (m ³ /h)					
Nafta	248,95	162,68	61,53		
Querosene	131,57	90	32,98		
Diesel	91,52	96	63,98		
Gasóleo Atmosférico	83,84	99	71,06		
GORT	0,68	0,045	1,62		
GOL	33,73	6,59	34,83		
GOP	110,00	82,29	135,73		
Resíduo Vácuo	94,61	257	393,16		

Tabela 4.3 – Resultados da implementação – petróleo leve, *blend*, petróleo pesado.

Os resultados apresentados demonstram para os fluxos dos produtos relatados um comportamento esperado, com maiores rendimentos para os produtos mais pesados nas configurações de alimentação de petróleo pesado e *blend*. Para o *blend*, verifica-se uma aproximação maior com o petróleo pesado, quer seja pelos critérios adotados no cálculo da curva PEV, quer seja pelos resultados obtidos com a inserção de reciclos circulantes na coluna atmosférica. A configuração inicial para o caso de *blend* apresentou um rendimento muito baixo para ambos os produtos da coluna a vácuo, resultado que não foi verificado da mesma forma para os casos do petróleo leve e do petróleo pesado.

A situação inicial no que tange a especificação dos produtos é apresentada nas Figuras 4.7 e 4.8, para os casos de alimentação de petróleo leve e petróleo pesado, respectivamente. Nas Figuras 4.7 e 4.8, as flechas indicam os pontos da curva ASTM D86 para cada especificação de produto, conforme estabelecido na Tabela 4.1. As flechas indicando pontos nos cortes de produtos, dizem respeito a faixa na qual o produto encontrase dentro da especificação, com limites superior e inferior denominados por "Spec inf" e Spec sup". As flechas apontando para a curva do resíduo, indicam a fração de produto presente no resíduo atmosférico (entrada da coluna de vácuo). As flechas que apontam para especificação na curva do resíduo de vácuo indicam a faixa do produto que está presente neste.

Pela Figura 4.9, verifica-se que apenas o gasóleo leve (GOL) está fora da faixa de especificação desejada, pois os pontos que indicam a faixa de temperatura ASTM D86 na qual o GOL deve ter 95% da fração do seu volume vaporizado encontram-se na corrente de retirada do produto gasóleo pesado (GOP). Isto que significa que cerca de 80 a 95% do volume da corrente de retirada do produto GOP deve ser retirado na corrente de retirada de produto GOL. Para se atender a esta especificação, frações leves do GOP devem ser deslocadas para a corrente de retirada de produto GOL. Atendendo-se às especificações, que devem ser conjuntas, o fluxo de produto GOP deve ser 60% superior em volume ao fluxo de produto GOL.



Figura 4.9 – Situação inicial – petróleo leve.



Figura 4.10 – Situação inicial – petróleo pesado.

Pela Figura 4.10, a configuração de alimentação com petróleo pesado encontra-se com ambos os produtos fora de especificação. Aqui também, deve-se deslocar frações leves da corrente de retirada do produto GOP pesado para a corrente de retirada GOL, e da corrente GOL para a corrente GORT, a fim de que os produtos da coluna de destilação a vácuo estejam dentro da especificação. O produto GOP está 5% abaixo da especificação mínima (40 % vol. de GOL + GOP com ASTM D86 95% Recuperado igual 377°C e 60% vol. de GOL + GOP na corrente GOP), e o produto GOL está 3% abaixo da especificação mínima. Além disso, cerca 25% da fração leve do produto resíduo de vácuo (RV) são passíveis de serem deslocadas para a corrente de retirada de GOP.

4.6. Conclusões

Os procedimentos considerados na implementação da coluna de destilação a vácuo realizado apresentaram as diferenças primordiais no que se refere à complexidade da unidade que se pretendia implementar neste trabalho, dado aos equipamentos auxiliares necessários (trocadores de calor acoplados, *spliters*) e a forma pela qual são dispostos (dois reciclos, sendo que um deles com duas saídas). A estratégia de implantação, pela divisão da coluna de vácuo em estágios mostrou-se extremamente vantajosa, por representar o

comportamento da coluna de modo mais realístico. A comparação com resultados da literatura apresentou boa representatividade, com ressalvas para considerações quanto a especificação do vapor utilizado, e a pressão da coluna, indisponíveis na literatura para sistema em forma semelhante à apresentada neste trabalho. A apresentação das especificações de produto para a coluna de destilação a vácuo, pela configuração adotada, e a demonstração dessas especificações às curvas ASTM D86 para os resíduos atmosféricos em cada um das configurações de alimentação consideradas determina as estimativas para os fluxos iniciais de produto a serem considerados na implantação da coluna a vácuo. A implantação da coluna de destilação a vácuo apresentou produtos fora de especificação para todas as configurações estudadas, necessitando, portanto, de um procedimento tanto para ajustar os produtos as especificações quanto para melhoria dos rendimentos.

Capítulo 5 – Otimização da coluna de destilação a vácuo.

Uma otimização consiste em melhoramento de valores de variáveis em função de um objetivo específico a ser atingido (função objetivo). Para tanto, a otimização deve levar em conta limitações operacionais.

Neste capítulo, apresentam-se os casos que foram levados em consideração para se realizar a otimização. Primeiramente, tomando-se a situação inicial para cada caso, apresentam-se os objetivos da otimização, juntamente com as restrições levadas em conta, baseadas em uma análise prévia de sensitividade, a fim de se determinar as variáveis mais apropriadas para a otimização.

5.1. Configurações de alimentação consideradas e situação inicial.

Para o procedimento de otimização, foram consideradas as configurações de alimentação de petróleo leve e de petróleo pesado. A situação inicial no que tange aos rendimentos de produto é apresentada na Tabela 4.3. As Figuras 4.7 e 4.8 apresentam os resultados os produtos da coluna de destilação a vácuo, para os casos de alimentação de petróleo leve e petróleo pesado, respectivamente, em situação de convergência inicial, que aqui é tratado como situação inicial para a otimização.

5.2. Análise de sensitividade.

Para a realização da otimização, torna-se necessário determinar os limites de convergência. Realizou-se uma pré-análise das variáveis, selecionando-se quatro delas para a análise de sensitividade, na configuração de petróleo leve, e quatro para a configuração de petróleo pesado. Os resultados da análise de limites de convergência são apresentados na Tabela 5.1.

Configuração de alimentação petróleo leve				
Fluxo de vapor (kg/h)	27,77	2103,47		
Temperatura de saída trocador estágio 1	26,32	100,00		
Temperatura de saída trocador estágio 2	82,00	86,04		
Posição da válvula de fração de GOP / retorno do estágio	0,5170	0,5665		
Configuração de alimentação petróleo pesado				
Fluxo de vapor (kg/h)	50,00	3068,00		
Temperatura de saída trocador estágio 1	75,71	97,79		
Temperatura de saída trocador estágio 2	26,53	78,77		
Posição da válvula de fração de GOP / retorno do estágio	0,4575	0,4764		

Tabela 5.1 – Limites de operação para variáveis de estudo.

Os limites de operação apresentados na Tabela 5.1 foram considerados tomando-se por base resultados de análises sensitivas monovariáveis de cada uma das variáveis consideradas e análises multivariáveis entre as mesmas. Os resultados apresentados neste capítulo dizem respeito a toda a região de convergência para a combinação de todas as variáveis apresentadas na Tabela 5.1. Portanto, o valor mínimo de uma variável da Tabela 5.1 representa o menor valor para o qual o sistema converge, e o maior valor corresponde ao valor máximo aonde se tem convergência para o sistema. Os limites apresentados na Tabela 5.1 contemplam apenas as modificações observadas nestas quatro variáveis apresentadas, mantendo-se todas as especificações do sistema considerado no capítulo 4.

O sistema adotado para a análise é o representado pela Figura 5.1.



Figura 5.1 – Sistema de coluna de destilação a vácuo considerado na análise sensitiva.

Nesta análise aqui considerada, o 1º estágio engloba as seções de alimentação do resíduo atmosférico, aquecimento no forno (FUR), e alimentação na coluna denominada por "CDV-1". O 2º estágio compreende a coluna denominada por "CDV-2", as correntes de retirada de líquido no fundo e retorno no topo, o trocador de calor acoplado a coluna (HE-CDV2), a válvula *spliter* que separa a corrente de saída do trocador de calor acoplado (SPT2), a corrente de produto GOP (HVGO), e de retorno de líquido sobrevaporizado ao 1º estágio (ROVER). O 3º estágio compreende a coluna denominada por "CDV-3", o trocador de calor acoplado a saída do líquido de fundo dessa coluna (HE-CDV3), a válvula *spliter* que separa a corrente de saída do trocador acoplado a saída do líquido de fundo dessa coluna (SPT1) em corrente de retorno de líquido ao topo da coluna e a corrente de produto GOL (LVGO).

Pela própria configuração da coluna, nota-se aqui, que a coluna de destilação a vácuo pode ser considerada também por duas partes, para efeitos de convergência e interação entre as variáveis aqui estudadas. Pela Figura 5.1, 2º e o 3º estágio tem um efeito de interdependência por duas correntes principais, a corrente de saída de vapor ascendente do 1º estágio (HVGO-IN) e a corrente de líquido sobrevaporizado descendente (ROVER). Esta dependência é apresentada na Figura 5.2, em um perfil da coluna do 1º estágio.



Figura 5.2 – 1º estágio – perfis de temperatura e fluxos de vapor e líquido.

O vapor ascendente corresponde à fração de alimentação vaporizada na zona de expansão no 1° estágio e o vapor de esgotamento, que percorre a zona de lavagem do 1° estágio, e todos os estágios. O líquido sobrevaporizado, percorre a zona de lavagem do 1° estágio. Como o fluxo de líquido sobrevaporizado deve obedecer limitações operacionais (Watkins, 1973) a influência do vapor ascendente, tanto no 2° quanto no 3° estágio é maior do que a influência que o líquido sobrevaporizado exerce nas variáveis do 1° estágio. Devido a isso, nota-se que a maior limitação para o fluxo do vapor de topo do 1° estágio é justamente o fluxo de líquido sobrevaporizado, pois, como a Figura 5.2 aponta, corresponde de 2% a 4% do volume do vapor da zona de expansão (correspondente ao trecho entre o 4° e o 5° estágio da coluna da Figura 5.2). Portanto, visto que existe um limite operacional no fluxo de líquido descendente, um limite máximo de fluxo de vapor deve garantir também que o sobrevaporizado cumpra seu papel na separação, reduzindo os componentes na faixa do resíduo de vácuo presentes no vapor que deixa o topo do 1° estágio e conseqüentemente melhorando a qualidade dos produtos.

5.2.1. Análise sensitiva - Petróleo leve

Os resultados da análise sensitiva para a configuração de petróleo leve são apresentados a seguir.



Figuras 5.3 e 5.4 – Comportamento dos produtos GORT e GOL com variação do fluxo de

vapor.



Figuras 5.5 e 5.6 – Comportamento dos produtos GOP e GOL+GOP com variação do fluxo de vapor.

Nas Figuras 5.3, 5.4, 5.5, e 5.6, tem-se a análise dos rendimentos dos produtos com a variação do vapor de esgotamento, alimentado no fundo da coluna. Na Figura 5.5, tem-se o comportamento do produto gasóleo pesado (GOP) com o aumento do vapor. Como a razão de refluxo é mantida constante no setor da coluna onde o GOP é retirado, o vapor retira as frações leves do líquido descendente, até um ponto limite. No ponto limite, o

fluxo de vapor acima deste ponto, não é condensado pelo líquido descendente do estágio de retirada de gasóleo pesado, mas segue para o estágio de gasóleo leve (GOL). Na Figura 5.4, verifica-se este comportamento, com uma redução do fluxo de gasóleo leve à medida que se aumenta o vapor de esgotamento, até um ponto mínimo, para ter-se um aumento a partir desse ponto. A Figura 5.3 apresenta o comportamento do gasóleo residual (GORT), obtido no topo do estágio de retirada do gasóleo leve. Como este representa o vapor do topo da coluna, e sua condensação se dá fora da coluna, antes do setor de geração de vácuo, não há líquido descendente, o que faz com que tenha aumento praticamente constante com o aumento do fluxo de vapor. Na Figura 5.6, temos o efeito conjugado dos fluxos de gasóleo leve e gasóleo pesado, indicando um aumento de fluxo de produto com o aumento de fluxo de vapor. O ponto final da curva representa uma limitação do sistema, ponto no qual a quantidade de líquido retornado para o topo do estágio e a quantidade de líquido retornado à zona de lavagem atingem um limite. Acima deste limite o líquido retornado a zona de lavagem é insuficiente para circular no recheio, causando a secagem do recheio e consequente não convergência no 1º estágio. Nas Figuras 5.7, 5.8, 5.9 e 5.10, analisa-se a influência da temperatura de retorno do reciclo circulante, no 2º estágio.



Figuras 5.7 e 5.8 – Comportamentos dos produtos GORT e GOL com variação da temperatura de retorno do reciclo circulante (2º estágio).



Figuras 5.9 e 5.10 – Comportamentos dos produtos GOP e GOL+GOP com variação da temperatura de retorno do reciclo circulante (2º estágio).

A temperatura de retorno do reciclo circulante apresenta uma grande influência no fluxo dos produtos, em especial no que se refere ao 2º estágio, onde se tem o maior fluxo de produto em todo o sistema. Pelo arranjo que a coluna atmosférica possui uma alteração na temperatura de retorno do reciclo, afeta o perfil da coluna como um todo, pois o vapor ascendente que segue para o estágio superior sobe com temperatura superior ou inferior alterando a eficiência da condensação, e parte retorna ao estágio inferior, como sobrevaporizado. Na Figura 5.9, verifica-se o efeito direto da temperatura de retorno do reciclo circulante no fluxo do gasóleo pesado, apresentando alto rendimento para baixas temperaturas de retorno e baixo rendimento para altas temperaturas de retorno. Isto se deve ao aumento da condensação do vapor ascendente ao entrar em contato com o líquido descendente com temperatura inferior. Como a análise apresentada considerou somente a variação da temperatura para o 2º estágio, a temperatura de retorno para o 3º estágio foi mantida constante. Na Figura 5.8, tem-se o comportamento para o 3º estágio, onde se verifica um alto fluxo de produto para uma alta temperatura de retorno de produto no 2° estágio. Isto se deve ao aumento de vapor que não foi condensado no 2º estágio devido a temperatura do líquido descendente. Em pontos onde a temperatura de retorno no 2º estágio é menor, verificamos uma redução no fluxo de GOL no 3º estágio, indicando a redução no vapor ascendente que é alimentado no fundo desse estágio. Já na Figura 5.7, temos o comportamento da variação de temperatura do retorno do 2º estágio para o fluxo de GORT, mostrando um aumento para regiões de baixa temperatura e um fluxo reduzido para regiões de alta temperatura. O fluxo de GORT é dependente da fração de vapor não condensada no

topo do 3º estágio; portanto, segundo a faixa considerada nesta análise, na região de alta temperatura de retorno, temos o aumento do GOL, e conseqüente redução de GORT. Na região de baixa temperatura de retorno, o aumento do fluxo de GOP reduz o fluxo de GOL por reduzir o fluxo de vapor ascendente para o 3º estágio, e aumenta o fluxo de GORT. Na Figura 5.10, apresenta-se o efeito conjunto dos produtos GOL e GOP, onde verificam-se duas regiões distintas. A primeira delas diz respeito à região de alta temperatura de retorno, onde a redução do fluxo de gasóleo pesado é compensada pelo aumento do fluxo de gasóleo leve. A segunda diz respeito à região de baixa temperatura de retorno, onde se tem o aumento do gasóleo pesado, e a redução da participação do gasóleo leve.

Nas Figuras 5.11, 5.12, 5.13 e 5.14, analisa-se a influência da razão de separação entre as correntes de GOP produto e reciclo do 2º estágio. Esta razão de separação corresponde a divisão de fluxo que o *spliter* do segundo estágio opera na corrente de retirada de líquido do ultimo prato do estágio. Portanto, o valor apresentado nestas s corresponde ao percentual retirado da corrente de líquido do 2º estágio como produto.



Figura 5.11 e 5.12 – Comportamentos dos produtos GORT e GOL com variação da razão de produto GOP e reciclo de líquido no 2º estágio pela válvula *spliter*.



Figura 5.13 e 5.14 – Comportamentos dos produtos GOP e GOL + GOP com variação da razão de produto GOP e reciclo de líquido no 2º estágio pela válvula *spliter*.

Na Figura 5.13, tem-se o comportamento do produto GOP com a variação da razão de produto GOP. Verifica-se que um aumento nesta fração implica em redução do fluxo do produto GOP. Isto se deve ao fato de que um aumento na fração implica em redução do fluxo de líquido de fundo que retorna ao topo do 2º estágio pelo reciclo, o que implica em redução do fluxo de líquido descendente ao longo do estágio. A redução do fluxo de líquido descendente do fundo do estágio implica numa menor quantidade de vapor condensada no estágio, o que acaba por reduzir o fluxo do produto no estágio. Na Figura 5.12, temos o efeito desta variação no fluxo do produto GOL. Aumentando-se a razão de produto GOP na válvula spliter do 2º estágio, verifica-se um aumento no fluxo do produto GOL. Isto se deve a redução do fluxo descendente no 2º estágio, que causa um aumento no vapor ascendente que segue para o 3º estágio. O aumento no fluxo de vapor do 3º estágio causa um aumento da condensação deste vapor no 3º estágio, aumentando o fluxo de produto GOL, visto que a fração do produto no spliter do 3º estágio permanece inalterada. Reduzindo-se a fração do produto GOP, observa-se um aumento do fluxo do produto GOP, e uma conseqüente redução do vapor ascendente que entra no 3º estágio, o que acaba por reduzir o fluxo do produto GOL. Na Figura 5.11, temos o comportamento do produto GORT com a variação da razão de produto GOP. Percebe-se um aumento de fluxo do produto GORT com a redução da razão de produto GOP. Isso deve-se ao efeito combinado observado no 2º e 3º estágio. Com a redução da razão de produto GOP, grande parte do vapor ascendente é condensado no 2º estágio, e pouco é condensado no 3º estágio. Com o baixo fluxo do produto GOP nessa condição, aumenta-se o fluxo do vapor ascendente no topo do 3º estágio, que se reflete no aumento do fluxo do produto GORT. O efeito combinado dos fluxos dos produtos GOL e GOP pode ser observado na Figura 5.14, onde grande parte do fluxo se deve ao produto GOP. Verifica-se nesta Figura que o aumento da fração de produto GOP, que causa uma redução no fluxo de produto GOP, é compensado pelo aumento do fluxo de produto GOL.

5.2.2. Analise sensitiva – Petróleo Pesado.

As Figuras 5.15 a 5.18 apresentam os resultados da análise sensitiva para a configuração de petróleo pesado. Nelas tem-se as análises dos comportamento dos rendimentos dos produtos com a variação do vapor de esgotamento, alimentado no fundo da coluna.



Figuras 5.15 e 5.16 – Comportamento dos produtos GORT e GOL com variação do fluxo

de vapor.



Figuras 5.17 e 5.18 – Comportamento dos produtos GOP e fluxo GOL + GOP com variação do fluxo de vapor.

Na Figura 5.17, tem-se o comportamento do produto GOP com a variação do fluxo do vapor de esgotamento. O aumento do fluxo de vapor aumenta o fluxo do produto GOP, pois o vapor ascendente tem suas frações mais pesadas condensadas com o contato deste com o líquido descendente oriundo do retorno. Comparando-se com o resultado obtido para o fluxo do mesmo produto para a configuração de alimentação petróleo leve, nota-se que o fluxo para este produto não apresenta um ponto limite, conforme observado para a configuração com petróleo leve. Observa-se também que nesta configuração um fluxo maior de vapor pôde ser aplicado. Pode-se concluir daqui, que a configuração do sistema em estudo apresenta uma situação de não-convergência antes de o sistema atingir este ponto, ou seja, a condição de fluxo mínimo de líquido sobrevaporizado no 1º estágio deixa de ser atingida para um valor de fluxo de vapor antes do ponto máximo de retirada de produto GOP. Na Figura 5.16, observa-se o comportamento do produto GOL. O comportamento do produto GOL apresenta redução de fluxo com o aumento do fluxo do produto GOP, uma vez que o aumento de vapor de esgotamento causa um aumento da condensação do vapor ascendente no 2º estágio, e conseqüente redução do fluxo de vapor ascendente no 3º estágio, causando a redução do fluxo do produto GOL. Com a redução do fluxo do vapor de esgotamento, tem-se a conseqüente redução do fluxo do produto GOP, o que implica no aumento do fluxo do vapor ascendente na entrada do 3º estágio. Assim como observado para o produto GOP, o aumento do vapor ascendente na entrada do estágio provoca um aumento do líquido descendente, com o conseqüente aumento do produto GOL. Analisando-se conjuntamente as Figuras 5.16 e 5.17, percebe-se que o fluxo de vapor ascendente no topo do 2º estágio é condensado no 3º estágio, provocando um aumento dos fluxos dos produtos GOL e GOP, como apresentado na Figura 5.18. Na Figura 5.15, tem-se o comportamento do fluxo produto GORT em relação a variação do vapor de esgotamento. Percebe-se que o fluxo do produto GORT está ligado ao fluxo não condensado de vapor ascendente no topo do 3º estágio, pois para um aumento de fluxo de vapor de esgotamento, quando grande parte do vapor é condensado no 2º estágio, observa-se uma queda no fluxo de produto GOL, que reflete em maior fluxo de vapor ascendente no topo do 3º estágio. Para a redução do fluxo de vapor de esgotamento, com o aumento do fluxo de produto GOL, tem-se uma redução do vapor ascendente no topo do 3º estágio, e conseqüente redução do fluxo do produto GORT.

As Figuras 5.19, 5.20, 5.21 e 5.22 apresentam o comportamento do fluxo dos produtos em relação a variação da razão de fluxo de produto GOP e fluxo de reciclo de líquido no 2º estágio pela válvula *spliter*.



Figuras 5.19 e 5.20 – Comportamento dos produtos GORT e GOL com variação da razão de produto GOP e reciclo de líquido no 2º estágio pela válvula *spliter*.



Figuras 5.21 e 5.22 – Comportamento dos produtos GOP e fluxos GOL + GOP com variação da razão de produto GOP e reciclo de líquido no 2º estágio pela válvula *spliter*.

Na Figura 5.21, tem-se o comportamento para o produto GOP. Verifica-se que o aumento da razão de produto GOP reduz o fluxo do produto GOP, pois o aumento do fluxo de produto necessariamente reduz o fluxo de reciclo do 2º estágio, o que reduz também a quantidade do líquido descendente em contato com o vapor ascendente no estágio. Comparando-se a Figura 5.21 com a Figura 5.13 (configuração de alimentação de petróleo

leve), verifica-se uma modificação sensível no que se refere ao perfil apresentado, onde se tem para a Figura 5.21 um perfil linear. Isso se deve à redução das frações leves que existe entre as duas configurações de alimentação aqui estudadas. No caso em que a presença de frações leves é maior (Figura 5.13), o retorno de líquido possui uma fração menor de frações leves ao se reduzir a razão de reciclo de produto, até um ponto onde readquire comportamento linear, onde passa a apresentar apenas uma transferência de fluxo para o produto GOL(Figura 5.12). No caso do petróleo pesado, esta fração é mínima, o que faz com que a curva que apresenta o comportamento para os produtos GOL e GOP (Figuras 5.20 e 5.21) seja praticamente linear. Na Figura 5.16, verifica-se que o aumento do produto GORT dá-se principalmente no ponto de maior fluxo de produto GOP, onde o fluxo de GOP é menor, e o fluxo de vapor no topo do 3º estágio volta a aumentar.

As Figuras 5.23, 5.24, 5.25 e 5.26 apresentam o comportamento dos produtos com a variação da temperatura de retorno de reciclo de líquido no 2º estágio.



Figuras 5.23 e 5.24 – Comportamento dos produtos GORT e GOL com variação da temperatura de retorno de reciclo de líquido no 2º estágio.



Figuras 5.25 e 5.26 – Comportamento dos produtos GOP e fluxos GOL + GOP com variação da temperatura de retorno de reciclo de líquido no 2º estágio.

Na Figura 5.25, tem-se o comportamento do produto GOP. Nota-se que a redução da temperatura de retorno de reciclo de líquido no 2º estágio provoca um aumento do fluxo do produto GOP pelas mesmas razões apresentadas para a situação de configuração de alimentação de petróleo leve. Novamente aqui, a presença menor de frações leves implica em um comportamento praticamente linear. Na Figura 5.24, tem-se a situação para o produto GOL, onde a redução da temperatura de retorno provocou uma diminuição do fluxo de vapor ascendente, diminuindo assim o fluxo do produto GOL. A Figura 5.23 apresenta o efeito no vapor do topo do 3º estágio, onde o aumento do fluxo ascendente com a redução da temperatura deve-se principalmente a redução do fluxo de líquido descendente no 3º estágio. Os efeitos da variação da temperatura de retorno de reciclo de líquido no 2º estágio para o fluxo dos produtos principais pode ser mais bem observado na Figura 5.26, onde se tem a soma dos fluxos dos dois produtos principais. Em todas as variáveis estudadas para a resposta da soma dos fluxos dos produtos principais (Figuras 5.6, 5.10, 5.14, 5.18, 5.21e 5.26), verifica-se que as variáveis mais relevantes para a variação de fluxo estão relacionadas basicamente à variação do fluxo de vapor de esgotamento (Figuras 5.6 e 5.18), com variações superiores a $10m^{3}/h$, o que significa dizer que as variações do produto GORT são de pouca influência para as análises como um todo.

Por fim, destaca-se a análise levando em conta variações apenas no 3º estágio. Este estágio tem um fluxo bastante reduzido em comparação ao fluxo do 2º e 3º estágio, além de não apresentar efeitos de interação tanto nos fluxos quanto na qualidade dos produtos do 2º e 3º estágio, visto que é alimentado por uma corrente de vapor ascendente do 2º estágio, e

que o líquido descendente não retorna ao segundo estágio. A limitação de convergência para este estágio deve-se exclusivamente a variáveis que interferem nos fluxos internos de vapor e líquido deste. Nas Figuras 5.27, 5.28, 5.29 e 5.30, analisa-se a influência da variação da temperatura de retorno de reciclo de líquido no 3º estágio.



Figuras 5.27 e 5.28 – Comportamento dos produtos GOP e fluxos GOL + GOP com variação da temperatura de retorno de reciclo de líquido no 3º estágio.



Figura 5.29 – Comportamento dos produtos GOL + GOP com variação da temperatura de retorno de reciclo de líquido no 3º estágio.

O Comportamento do Produto GOP com a variação da temperatura de retorno do reciclo de líquido no 3° estágio mostrou-se invariável, pelo fato que a variação não reflete em alteração dos fluxos do 2° estágio. Portanto, a análise do comportamento dos fluxos dos produtos GOL e GOP (Figura 5.29) trata-se apenas do comportamento do fluxo de GOL acrescido do valor para o fluxo do produto GOP, que manteve-se em 136 m³/h.

Na Figura 5.28, observa-se o comportamento do produto GOL para a variação da temperatura de retorno de reciclo de líquido. Como visto nas análises anteriores, a redução da temperatura de retorno do reciclo aumenta o fluxo de produto GOL, diminuindo o fluxo de vapor ascendente no topo da coluna. Na Figura 5.27, observa-se o comportamento do produto GORT frente a esta variação. Temos o aumento do fluxo do produto GORT, aumentando com a diminuição do produto GOL, para o trecho onde o fluxo de líquido descendente deste produto é reduzido, e a conseqüente redução do fluxo do produto GORT, para o trecho onde o produto GOL atinge seu valor máximo. A condição limitante para o aumento da temperatura de retorno de reciclo de líquido no 3º estágio é o fluxo do líquido descendente, que se torna insuficiente no 3º estágio para temperaturas superiores a 80°C.

5.3. Otimização da coluna a vácuo.

Realizou-se a otimização da coluna para configurações de alimentação de pretroleo leve e petróleo pesado. O objetivo principal foi o aumento no rendimento dos produtos gasóleo leve e gasóleo pesado. Portanto, a função objetivo adotada foi a soma dos produtos gasóleo leve (GOL) e gasóleo pesado (GOP), e pode ser expressa por:

$$função objetivo = GOL + GOP \tag{5.1}$$

As Tabelas 5.2 e 5.3 sumarizam os procedimentos adotados para a otimização. Nelas, podemos verificar que uma alteração no modo de se especificar os produtos foi adotada, para fins de formalização e comparação dos dois resultados (temperaturas ASTM para o GOL).

Restrições – Coluna a vácuo (petróleo leve)					
Temperatura ASTM D86 95% (faixa)	377°C			410°C	
Temperatura saída GOL	≤		Temperatura saída GOP		
Faixa de operação – variáveis					
Fluxo de vapor (kg/h)		27,77		2103,47	
Temperatura de saída trocador estágio 1		26,32	°C	100,00°C	
Temperatura de saída trocador estágio 2		82°C		86,04°C	
Posição da válvula de fração de GOP / retorno do estágio		0,517034		0,5665	

Tabela 5.2 – Procedimentos adotados para otimização - petróleo leve.

Tabela 5.3 – Procedimentos adotados para otimização – petróleo pesado.

Restrições – Coluna a vácuo (petróleo pesado)				
Temperatura ASTM D86 95% (faixa)	377°C	410°C		
Faixa de operação – variáveis				
Fluxo de vapor (kg/h)	50	3068		
Temperatura de saída trocador estágio 1	75,71°C	97,79°C		
Temperatura de saída trocador estágio 2	26,53°C	78,77°C		
Posição da válvula de fração de GOP / retorno do estágio	0,4575	0,4764		

As Tabelas 5.2 e 5.3 sumarizam os procedimentos adotados para a otimização. Nelas, pode-se verificar que uma alteração no modo de se especificar os produtos foi adotada, para fins de formalização e comparação dos dois resultados (temperaturas ASTM para o GOL). Os resultados são apresentados nas Tabela 5.4 e 5.5.

Função objetivo adotada = maximizar fluxo GOL + GOP.				
Variável	Valor inicial	Valor final	Unidades	
Fluxo GOL	33,55	34,05	m³/h	
Fluxo GOP	110,02	113,50	m³/h	
Restrições adotadas				
	Valor inicial	Valor final	Unidades	
ASTM D86 95% (410)	410,16	409,85	°C	
ASTM D86 95% (377)	410,16	409,85	°C	
Temperatura saída GOL	60	26,32	°C	
Temperatura saída GOP	82,58	75,28	°C	
Variáveis				
	Valor inicial	Valor final	Unidades	
Fluxo de vapor	1063	1823,17	Kg/h	
Temperatura saída GOP	60	75,28	°C	
Fração retirada GOP	0,5632	0,5665		
Temperatura saída GOL	60	26,32	°C	
Número de iterações SQP	26			

Tabela 5.4 - Resultados otimização - petróleo leve.
Função objetivo adotada = maximizar GOL + GOP				
Variável	Valor inicial	Valor final	Unidades	
Fluxo GOL	42,42	53,62	m³/h	
Fluxo GOP	142,20	131,00	m³/h	
Restrições adotadas				
	Valor inicial	Valor final	Unidades	
ASTM D86 95% (410)	365,39	377,04	°C	
ASTM D86 95% (377)	365,39	377,04	°C	
Variáveis				
	Valor inicial	Valor final	Unidades	
Fluxo de vapor	1063	1823,17	Kg/h	
Temperatura saída GOP	60	95,36	°C	
Fração retirada GOP	0,5	0,4632		
Temperatura saída GOL	80	55,72	°C	
Número de iterações SQP	18			

Tabela 5.5 – Resultados otimização – petróleo pesado.

Nas tabelas 5.4 e 5.5, podemos verificar que houve uma pequena melhora nas condições de operação, bem como nos rendimentos dos produtos. Visto que os produtos estavam, para ambas as configurações, fora da faixa de especificação, o sistema teve de se adaptar para cumprir as restrições que o sistema apresentou. Como apresentado na análise de sensitividade no item anterior, a maximização da função objetivo adotada tem uma influência maior do fluxo de GOP. Portanto, conforme os gráficos apresentados para os produtos GOL e GOP, os pontos de máximo para a função-objetivo aqui adotada correspondem a regiões próximas ao máximo em todas as variáveis consideradas nesta simulação. Mais ainda, as regiões de máximo, apresentam patamares, ou pequena inclinação, resultando em um máximo regido pelas limitações do sistema. Como a maximização dos fluxos dos produtos está sujeita a uma proporção entre eles (60% do fluxo de destilado para o GOP, e temperatura ASTM D86 compreendido em uma faixa, para o GOL), a possibilidade de se maximizar cada um individualmente, resultaria em produtos fora de especificação. O resultado para os produtos, no que se refere as especificações, pode ser melhor visualizado pelas Figuras 5.30 e 5.31, que apresentam todos os produtos de ambos os casos considerados.



Figura 5.30 – Situação otimizada – petróleo leve.



Figura 5.31 – Situação otimizada – petróleo pesado.

Verifica-se pelas Figuras 5.30 e 5.31, e pelas Tabelas 5.4 e 5.5 que os produtos atendem as especificações adotadas para os produtos considerados. Os resultados para as

duas otimizações não apresentaram um ganho efetivo de rendimento de produto, mas ajustaram os produtos de acordo com as especificações exigidas para estes.

5.4. Conclusão

Os limites de convergência para as variáveis de estudo levaram em consideração extremos de situações de não convergência, o que garante que o método de otimização empregado tenha um horizonte de busca razoável.

A análise de sensitividade foi útil ao descrever o comportamento das variáveis consideradas para o estudo de otimização. Por meio desta, pode-se determinar a influência de cada variável nos fluxos de cada um dos produtos, de modo a obter-se uma melhor compreensão destes, cumprindo um dos objetivos deste trabalho.

Pela análise de sensitividade, verificou-se que de modo geral, o fluxo de vapor tem uma influência mais ampla sobre o fluxo dos produtos do que as outras variáveis do processo. A limitação para seu fluxo máximo se dá por uma limitação de sistema, pelo fato do fluxo de vapor ascendente estar ligado ao fluxo de líquido sobrevaporizado. Para ambos os tipos de petróleo, as variações tanto na razão de produto quanto na temperatura de retorno de reciclo de líquido no 2° estágio mostraram-se equivalentes. Depreende-se daqui que a variação na razão de produto é mais viável de um ponto energético, por não implicar em aumento de fluxo de água de refrigeração nos trocadores de calor, pois produz efeito equivalente.

A análise dos resultados apresentou ainda que as variáveis consideradas para a otimização com atuação no 2° estágio exercem influência significativa nos fluxos dos produtos do 3° estágio, e, pelo fluxo de líquido sobrevaporizado, influência significativa nos fluxos do 1° Estágio. Verificou-se ainda que as variáveis consideradas para a otimização com atuação no 3° estágio não exercem influência nos fluxos dos produtos de outros estágios.

Comparando-se os resultados obtidos com a comparação entre resultados para a configuração de alimentação de petróleo leve e petróleo pesado, conclui-se que o tipo de petróleo empregado tem grande importância na resposta do sistema, visto que houve alteração no perfil de resposta dos fluxos, considerando as mesmas variáveis consideradas para a configuração de alimentação petróleo leve.

Sobre os resultados da otimização, conclui-se que atingiram o objetivo no sentido de adequar os produtos as especificações. O aumento de fluxo de produto não apresentou um aumento significativo, mas fazendo-se uma comparação entre valores iniciais para as variáveis envolvidas na simulação com seus valores finais (ou otimizados), verifica-se que uma das causas seja a proximidade da situação inicial com a configuração apontada pelo resultado final. Considerações quanto às limitações do sistema devem ser feitas aqui, visto que o próprio procedimento de implementação da coluna de destilação a vácuo segundo a metodologia apresentada neste trabalho (estágio a estágio) já implica em investigação de valores próximos dos ideais a cada estágio introduzido no ambiente de simulação, o que pode ter conduzido a simulação à condições próximas das apontadas na otimização.

Capítulo 6 – Simulação dinâmica.

Neste capítulo, apresenta-se a simulação dinâmica da coluna de destilação a vácuo ligada à coluna atmosférica. Para isso, apresentam-se considerações sobre o processo de modificação do sistema em estudo (em estado estacionário) para o ambiente dinâmico, com as inclusões e modificações adotadas para a simulação a fim de que se proceda à implementação em condições dinâmicas. Em seguida, apresenta-se o caso de estudo para simulação dinâmica, e os resultados obtidos.

6.1. Procedimento de estabelecimento de simulação dinâmica.

Para o estabelecimento de uma simulação dinâmica, necessita-se recorrer a outro ambiente, denominado ASPEN DYNAMICS. Este ambiente apresenta duas opções de geração de simulações: uma, em que se pode trabalhar com simulações dinâmicas próprias, onde segue-se um procedimento semelhante ao ambiente ASPEN PLUS, em que o sistema é montado bloco a bloco, corrente a corrente, e após isso, ser executado e atingir convergência, ou pode-se optar por uma migração. Aqui optou-se pela migração, uma vez que os valores estacionários de todas as variáveis já estão determinados no ambiente ASPEN PLUS, e a convergência já atingida.

A migração consiste na exportação de uma simulação convergida a partir do ambiente ASPEN PLUS, com modificação do modo de modo "*Flowsheet*" em modo "*Dynamic*". Essa modificação libera os blocos do sistema para a inserção adicional de parâmetros dinâmicos, (tais como espaçamento entre pratos, altura de vertedouro, diâmetros de coluna e queda de pressão) que serão usados para os cálculos dinâmicos. Com estes parâmetros fornecidos, e o sistema convergido para estes parâmetros adicionais, o sistema está pronto para a exportação. Estes parâmetros se fazem necessários para o cálculo de sistemas de controle de nível e pressão que o simulador ASPEN DYNAMICS gera por definição.

A exportação consiste na tradução da simulação em ambiente de estado estacionário, para o ambiente em dinâmico. O ambiente de simulação ASPEN PLUS gera um arquivo de exportação para ser executado no ambiente de simulação dinâmico ASPEN

DYNAMIC, que calcula a partir deste arquivo traduzido os valores iniciais para a simulação dinâmica.

Durante o processo de exportação de uma simulação em estado estacionário com parâmetros dinâmicos, o módulo tradutor pode apontar algumas incompatibilidades entre os programas que necessitem serem corrigidas antes da geração do arquivo de exportação. Essas correções dizem respeito aos parâmetros dinâmicos inseridos, ou algum bloco ou recurso disponível no ambiente de simulação ASPEN PLUS que não seja suportado pelo ambiente de simulação ASPEN DYNAMICS. Não havendo correções adicionais, o módulo tradutor comanda a geração do arquivo de exportação, que pode ser carregado no ambiente de simulação ASPEN DYNAMICS. As Tabelas 6.1, 6.2 e 6.3 apresentam os parâmetros físicos introduzidos usados na exportação do sistema para o ambiente de simulação ASPEN DYNAMICS, para coluna atmosférica, colunas auxiliares a coluna atmosférica e coluna a vácuo (determinada pela abordagem de estágios). Nas Tabelas 6.1,6.2 e 6.3, os campos "início da seção" e "final da seção" representam o número de estágios especificados na simulação em estado estacionário, que para a migração tornam-se pratos ao receberem dimensões. Para secões com apenas 1 estágio, entenda-se 1 prato, de modo que para secões de mais de um estágio, temos número de pratos igual ao número de estágios. Seções com início e fim no 1º estágio, representam as dimensões do tanque de refluxo, caso no qual a altura de vertedouro representa a fração volumétrica de líquido no tanque.

Inicio da	final da	Diâmetro (m)	Espaçamento	Altura de
seção	seção	Diametro (m)	entre pratos (m)	vertedouro (m)
1	1	3	4	2
2	4	4	0,8	0,2
5	10	4	0,8	0,2
11	12	2	1	0,05
13	33	2	0,6096	0,05
34	34	2	2	1

Tabela 6.1 – Parâmetros físicos usados na exportação – Coluna atmosférica

Tabela 6.2 - Parâmetros físicos usados na exportação - Colunas auxiliares

Inicio da	Final da	Diâmetro (m)	Espaçamento	Altura de
seção	seção		entre pratos (m)	vertedouro (m)
1	3	7,2	2,5	0,02
4	4	2	2	1

3° Estágio				
Inicio da	Final da		Espaçamento entre	Altura de
seção	seção	Diâmetro(m)	pratos (m)	vertedouro (m)
1	3	2	0,6096	0,05
4	4	2	2	1
2º Estágio				
Inicio da	Final da		Espaçamento entre	Altura de
seção	seção	Diâmetro (m)	pratos	vertedouro (m)
1	3	2	0,6096	0,05
4	4	2	2	1
1º Estágio				
Inicio da	Final da	Diâmetro (m)	Espaçamento entre	Altura de
seção	seção		pratos (m)	vertedouro (m)
1	3	12	2	0,03
4	4	12	2	0,03
5	7	10	1	0,03
8	8	6	5	0,02

Tabela 6.3 – Parâmetros físicos usados na exportação – Coluna a vácuo

É importante observar aqui que não houve procedimento de otimização dos parâmetros físicos das colunas aqui apresentadas; as dimensões externas da coluna foram baseadas em trabalhos da literatura (Ratovskii et al., 2004; Lebedev et al., 2004), que apresentam similaridades com o sistema em estudo neste trabalho.

A configuração *default* do simulador para o dimensionamento é de espaçamento de pratos de 0,60m, e altura de vertedouro de 0,05m. Este trabalho considerou estes valores inicialmente, e posteriormente alterou-se a fim de que a configuração se adequasse às dimensões externas de coluna de trabalhos da literatura.

Com as alterações efetuadas, e o sistema convergido para as novas configurações, procedeu-se a exportação. A introdução dos parâmetros dinâmicos a simulação alterou os fluxos do processo, deslocando-os de seus valores otimizados.

6.2. Simulação dinâmica.

A simulação dinâmica foi definida para se avaliar o comportamento do sistema mediante a variação de carga do sistema. A carga selecionada para variação no sistema foi: Vazão de alimentação (sistema como um todo).

A primeira variação de carga do sistema estudado é a variação da vazão de alimentação do sistema (sistema destilação atmosférica e destilação a vacuo) em 10%. A alimentação de petróleo ao sistema, em 975 m³/h foi alterada para 877,5 m³/h. A Figura 6.1 apresenta o sistema considerado. As Figuras 6.2 a 6.10 apresentam os resultados para a variação do fluxo de alimentação do sistema em 10%. A perturbação considerada para avaliação ocorreu no tempo 21,50h.



Figura 6.1- Sistema considerado para simulação dinâmica.



Figuras 6.2 e 6.3 – Resposta a variação do sistema de destilação atmosférica (Fluxo de Resíduo atmosférico e Temperatura ASTM D86 95%).



Figuras 6.4 e 6.5 – Resposta a variação do sistema destilação a vácuo em malha aberta (ASTM D86 95% e Fluxo RV)

As Figuras 6.2 e 6.3 apresentam a resposta do fluxo e da qualidade do produto RA com a redução de 10% do fluxo da alimentação, apresentando estabilização em menos de 4 horas após a redução da carga. As Figuras 6.4 e 6.5 apresentam a resposta do fluxo e da qualidade do produto RV com a redução do fluxo de alimentação. Observando-se a Figura 6.2, se percebe um aumento na temperatura ASTM D86 95% recuperado, o que indica um produto mais pesado, mas como o aumento foi inferior a 1°C, pode-se admitir que não haja uma mudança significativa na qualidade da fração que alimenta a coluna de destilação a vácuo. Portanto, a redução de fluxo de alimentação da coluna atmosférica, implicou num aumento de fluxo no resíduo atmosférico.

Já nas Figuras 6.4 e 6.5, tem-se a resposta em malha aberta da coluna de vácuo para o resíduo. O resíduo atmosférico tendo um aumento de fluxo foi alimentado à coluna de vácuo, e esta respondeu com uma redução de temperatura de saída do forno (aumento de fluxo de matéria para a mesma quantidade de calor). Com esta redução, aumenta-se a fração de líquido descendente da zona de expansão, aumentando-se também seu fluxo. A ação combinada dos dois fatores causa o aumento das frações pesadas no resíduo de vácuo.



Figuras 6.6 e 6.7 – Resposta a variação do sistema destilação a vácuo em malha aberta (ASTM D86 95% e Fluxo GOP).

Pode-se perceber pelas Figuras 6.6 e 6.7 que a resposta para o produto GOP apresenta comportamentos complementares. Da análise sensitiva realizada, uma redução no fluxo de produto provoca uma conseqüente mudança nas frações dos componentes leves deste produto, fazendo com que reduzam, como observado aqui. A redução acontece na fração de petróleo, embora o fluxo de vapor do fundo do 1º estágio continue inalterado. Portanto, o vapor ascendente, que percorre o 2º estágio fica menos rico em frações pesadas, e mais rico em frações leves. O efeito final disto no produto GOP é a redução de seu fluxo e aumento de sua temperatura ASTM D86 95% recuperado. Menor quantidade de vapor ascendente implica necessariamente em menor fluxo de líquido descendente no 2º estágio, fazendo com que a redução de fluxo deste produto seja ainda menor, como observado na Figura 6.7.



Figuras 6.8 e 6.9 – Resposta a variação do sistema destilação a vácuo em malha aberta (ASTM D86 95% e Fluxo GOL).

As Figuras 6.8 e 6.9 apresentam a resposta do produto GOL à redução de fluxo de alimentação. Uma característica a ser notada aqui, foram as diferenças apresentadas no que se refere ao tempo necessário para que outro estado estacionário fosse atingido. Enquanto que para resíduo de vácuo e gasóleo pesado um novo estado estacionário fora atingido, para os produtos do 3º estágio não atingiram seus valores no novo estado estacionário. O mesmo comportamento foi observado para o produto GORT (Figura 6.10), que apresentou aumento de temperatura ASTM D86, mas dentro das 40 horas da simulação não havia atingido uma nova condição de equilíbrio.



Figura 6.10 – Resposta à variação no sistema de destilação a vácuo em malha aberta (ASTM D86 95% produto GORT)

Para enriquecer a análise do sistema no modo dinâmico, torna-se necessária uma investigação do comportamento do vapor em questão. Para isso, apresenta-se nas Figuras 6.11, 6.12, 6.13 e 6.14 os perfis de temperatura, fluxo máximo e temperatura.



Figura 6.11 – Perfil da simulação dinâmica para o produto GORT.

No perfil apresentado na Figura 6.11, temos o fluxo mássico para o GORT ao longo da simulação. Note-se aqui que o valor representado pela legenda TC na Figura 6.11 trata-se da temperatura da corrente, e não a temperatura ASTM D86 já apresentada anteriormente para a corrente de produto GORT. Como observado anteriormente, a corrente não foi desenvolvida até que se fosse atingido novamente o estado estacionário. As condições do vapor ascendente que entra no fundo do 3º estágio são apresentadas na Figura 6.12.



Figura 6.12 – Perfil da simulação dinâmica para o vapor na entrada do 3º Estágio.

Como apresentado no comentário da Figura 6.11, a corrente de entrada de vapor ascendente no 3º estágio ainda não havia alcançado o novo estado estacionário. Das Figuras 6.11 e 6.13, pode-se verificar que o efeito mais proeminente apresentado para as duas correntes foi a modificação da pressão com a redução do fluxo de petróleo na alimentação do sistema como um todo, e ainda, que o 3º estágio possui uma resposta mais suave à carga aplicada ao sistema do que a resposta que o 2º estágio apresenta. Características do vapor que entra no 2º estágio ao longo da simulação são apresentadas na Figura 6.13.



Figura 6.13 – Perfil da simulação dinâmica para o vapor na entrada do 2º estágio.

O comportamento apontado pela Figura 6.13 demonstra que o tempo de resposta do 2º e 1º estágio são muito menores do que os obtidos para o 3º estágio.

6.3. Conclusões

A simulação do processo no regime dinâmico proporcionou um melhor entendimento do comportamento do sistema ao longo do tempo. O procedimento adotado para o preenchimento dos parâmetros dinâmicos para o estado estacionário não contou com um estudo a fim de se buscar uma otimização das dimensões internas ou externas para o sistema, mas apenas uma série de modificações para a convergência para o sistema com parâmetros dinâmicos fosse atingida. Assim sendo, a simulação dinâmica não parte propriamente de um sistema em estado estacionário com os valores otimizados, e sim de um sistema próximo das condições otimizadas.

A escolha do tipo de mudança de carga no sistema, bem como sua amplitude, apresentou-se muito conveniente para uma análise de redução de produção na unidade, fato comum na realidade, uma vez que a coluna de destilação a vácuo é bem dependente do resíduo atmosférico, e dos rendimentos obtidos na coluna de destilação atmosférica.

Capítulo 7 - Conclusões Finais

Como conclusão final, destaca-se a apresentação uma série de procedimentos de forma detalhada que possibilitaram a implementação da simulação deste complexo sistema em ambiente de simulação, bem como a análise do sistema por meio deste ambiente de simulação.

A implementação dos óleos considerados apresentou um resultado bastante condizente com o esperado, tendo inclusive boa predição. Os métodos disponibilizados para esta implementação no próprio ambiente de simulação mostraram-se equivalentes, apresentando boa representatividade. No entanto, como sugestão para futuros trabalhos, destaca-se a importância de trabalhos que englobem os sistemas considerados aqui juntamente com caracterizações mais completas, como por exemplo, caracterizações completas de óleos, com curvas de parafinicidade, teor de enxofre e metais.

O trabalho com a coluna de destilação atmosférica, base para o desenvolvimento do tema, mostrou boa representação, como mostrado através da comparação dos resultados obtidos através das simulações presentes neste trabalho com os resultados da literatura. Uma comparação mais ampla, envolvendo mais tipos de petróleos e outros tipos de configurações seria de grande contribuição para o campo. Dados sobre especificações de produto foram implementados, e o procedimento para a adequação dos produtos considerados na configuração de coluna atmosférica considerada ás especificações se mostrou bastante eficaz.

No desenvolvimento do tema principal deste trabalho, pode-se verificar a importância de ter-se desenvolvido com simulações conjuntas entre coluna de destilação atmosférica e colunas de destilação a vácuo. Tal fato deve-se, principalmente, à grande variação nas condições iniciais de alimentação sofridas pela coluna de destilação a vácuo de acordo com as configurações adotadas para a coluna de destilação atmosférica. Isto foi bem evidenciado com a modificação de configuração realizada para a coluna atmosférica, com a adição de reciclos circulantes, bem como o ajuste da configuração destes.

Procedimentos que analisaram os fluxos do processo de destilação a vácuo foram desenvolvidos, apresentando de forma detalhada casos de configurações iniciais de

convergência para o sistema. Os procedimentos para implementação de uma forma mais condizente com a configuração adotada no processo foram realizados, e apresentaram resultados satisfatórios, do ponto de vista da adequação dos produtos ás especificações adotadas.

O procedimento de otimização contou com uma análise de sensitividade, que contemplou uma varredura e uma pré-seleção das variáveis mais adequadas para que fossem atingidos os objetivos propostos. Dentre os aspectos que poderiam ampliar o campo da investigação e, consequentemente, melhorar os resultados da otimização apresentados neste trabalho, ressalta-se uma investigação por métodos estatísticos no que se refere a efeitos de interação entre as variáveis do processo, e a investigação desse sistema através de métodos determinísticos, a fim de se determinar possíveis presenças de máximos locais e globais. Esta investigação não pode ser concluída neste trabalho devido a limitações próprias do ambiente de simulação, que não conta com recursos de otimização por estes métodos.

A simulação do processo no regime dinâmico proporcionou um melhor entendimento do comportamento do sistema ao longo do tempo. O procedimento adotado para o preenchimento dos parâmetros dinâmicos para o estado estacionário não contou com um estudo a fim de se buscar uma otimização das dimensões internas ou externas para o sistema. Assim sendo, a simulação dinâmica não parte propriamente de um sistema em estado estacionário com os valores otimizados, e sim de um sistema próximo das condições otimizadas. A escolha do tipo de mudança de carga no sistema, bem como sua amplitude, apresentou-se muito conveniente para uma análise de redução de produção na unidade, fato comum na realidade, uma vez que a coluna de destilação a vácuo é bem dependente do resíduo atmosférico, e dos rendimentos obtidos na coluna de destilação atmosférica. Capítulo 8 – Sugestões para trabalhos futuros.

Como sugestão, a fim de garantir a inclusão de análises mais completas do sistema, uma caracterização de tipos de petróleo com dados sobre curvas de propriedades tais como concentração de enxofre, concentração de metais, dentre outros.

Simulações envolvendo óleos caracterizados em indústrias e refinarias nacionais podem fornecer instrumentos para comparações dos sistemas em prática nessas indústrias e auxiliar melhorias e modificações nestes.

A configuração estudada neste trabalho foi a configuração para base de combustíveis. Um novo trabalho, com uma configuração para base de lubrificantes contemplaria situações de outras refinarias e indústrias, para o mesmo intuito no qual o presente trabalho foi desenvolvido.

Um dos pontos de grande utilidade em futuros trabalhos seriam simulações que envolvessem o efeito nos rendimentos dos produtos pelas variações nas configurações mecânicas da coluna de vácuo, tais como número de pratos, diâmetro de pratos e espaçamento entre pratos, a fim de propor um projeto otimizado e propiciar sugestões em instalações existentes.

Outro ponto que seria útil em futuros trabalhos seria uma ampliação na simulação dinâmica do processo, analisando a resposta do sistema em malha aberta para várias outras cargas, tais como: aplicação de *blends* variados, variação em fluxos de vapor, temperatura de aquecimento do forno da coluna a vácuo e condições de operação na torre atmosférica. Após isso, uma análise do efeito de controladores na resposta do sistema, considerando sistemas aplicados a controle em plantas reais.

Referências

ALTGELT, K. H., BODUSZYNSKI, M. M. Composition and Analysis of Heavy Petroleum Fractions. Marcel Dekker Inc. New York, NY,USA, 1994

BAGAJEWICZ, M. J. On the design flexibility of Crude Atmospheric units. *Chem. Eng. Comm.* v.166, p. 111-136, 1998.

CAJANDER, B.C, HIPKIN, H.G., LENOIR, J.M. Prediction of Equilibrium Ratios from Nomograms of Improved Accuracy, *Journal of Chemical and Engineering Data*, v.5, p.251-259, 1960.

EDMISTER, W. C., LEE, B.I. Applied Hydrocarbon Thermodynamics, Second Edition, Gulf Publishing Co, 1984.

FARANDA, F., SERVIDA, A, ALOI, N. *Neural software to estimate vacuum residue quality*. Petroleum Technology Quarterly, Autumn, p. 63-71, 2002.

GOLDEN, S.W., VILLALANTI, D.C., MARTIN, G.R. Feed Characterization and Deepcut Vacuum Columns: Simulation and Design – Impact of High Temperatures Simulated Distillation. In AICHE SPRING NATIONAL MEETING, Atlanta, Georgia, 1994.

GOLDEN, S.W., *Troubleshooting vacuum unit revamps*. Petroleum Technology Quarterly, Summer, p. 107-113, 1998.

GRAY, M. R. Upgrading Petroleum Residues and Heavy Oils. Marcel Dekker Inc. New York, NY. USA, 1994

HANSON, D., MARTIN, M. Low capital revamp increases vacuum gas oil yield. *Oil & Gas Journal*, v. 18, p.100, 2002.

JI, S., BAGAJEWICZ, M. Rigorous procedure for the Design of Conventional Atmospheric Crude Fractionation Units. I. Targeting. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 40, p. 617-626, 2001.

JI, S., BAGAJEWICZ, M. Design of Crude Distillation Plants with Vaccum Units. I. Targeting. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v.41, p.6094-6099, 2002.

KISTER, H.Z., RHOAD, R., HOYT, K.A. Improve Vacuum-Tower Performance. *Chemical Engineering Progress*, September, p.36, 1996.

LEBEDEV, Y. N., CHEKMENEV, V.G., ZAITSEVA, T.M., ZIL'BERBERG, I.A., ISHMUKHAMETOV, R.M. Vakupak Packing for Vacuum Towers. *Chemistry and Technology of Fuels and Oils*, v. 40, p. 62-68, 2004

MARTIN, G.R., CHEATHAM, B.E. Keeping down the cost of revamp investment. *Petroleum Technology Quarterly*, Summer, p. 99-107, 1999.

MARTIN, G.R. Vacuum unit design effect on operating variables. *Petroleum Technology Quarterly*, Summer, p. 85-91, 2002.

NELSON, W.L., Petroleum Refinery Engineering, Fourth edition, Mac Graw-Hill, 1969.

RATOVSKII, Y.Y., LEBEDEV, Y.N., CHEKMENEV, V.G., Vakupak and Kedr Packing for Vacuum Towers on AVT Units. *Chemistry and Technology of Fuels and Oils*, v.40, p. 72-74, 2004.

SPEIGHT, J.G. The Chemistry and Technology of petroleum. Third edition, 1999.

WATKINS, R.N. Petroleum Refining Distillation. Gulf Publishing Company: Houston, TX, 1973.