

# VISCOSIDADE CINEMÁTICA: AVALIAÇÃO DE MODELOS DE PREDIÇÃO PARA FRAÇÕES DE PETRÓLEO NA FAIXA DA NAFTA LEVE

Sheila Maria dos Santos <sup>1</sup>

Leonardo Vasconcelos Fregolente <sup>2</sup>

## INTRODUÇÃO

Cálculos de projeto e operação em uma refinaria têm como base a aplicação de informações cruciais do petróleo e suas frações. Tais informações devem ser precisas e podem ser obtidas em laboratórios químicos de forma a caracterizar e medir propriedades dos hidrocarbonetos e frações do petróleo, como a nafta leve. Porém, devido ao tempo e até mesmo aos custos envolvidos em análises experimentais, obter propriedades físico-químicas, composição e propriedades de transporte do petróleo, produtos intermediários e finais torna-se inviável em uma produção de alto escala (RIAZI, 2005). Dessa maneira, muitos modelos preditivos de propriedades podem ser empregados para otimização do tempo e custo nos cálculos de processo .

A viscosidade cinemática (VC) é uma das principais propriedades de transporte utilizadas para controle e avaliação de processos e produtos (KUPPUSAMY et al., 2020). O cálculo dessa propriedade pode ser complexo devido à associação com a composição, a temperatura e outras propriedades químicas.

VC pode ser obtida através de modelos termodinâmicos utilizando dados mais complexos, como energia de ativação intermolecular, diâmetro das moléculas (VISWANATH et al., 2007), coeficiente de cisalhamento, tipo de escoamento (se Newtoniano ou não), movimento Browniano, entre outros (KIRKWOOD; BUFF; GREEN, 1949).

De forma a facilitar a predição de VC, muitos modelos empíricos foram desenvolvidos. Tais modelos se caracterizam por ser de fácil utilização requerendo propriedades usualmente disponíveis, se opondo aos modelos termodinâmicos. Entretanto a acuracidade proveniente dos modelos empíricos dependerá da restrição do método quanto a faixa de aplicação dos dados.

---

<sup>1</sup> Doutoranda do Curso de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP, [s209678@dac.unicamp.br](mailto:s209678@dac.unicamp.br) ;

<sup>2</sup> Professor orientador: Prof. Dr. Engenharia Química, Faculdade Engenharia Química - UNICAMP, [leovf@unicamp.br](mailto:leovf@unicamp.br).

O modelo de Abbot e colaboradores requer para estimar VC em qualquer temperatura apenas o fator de caracterização,  $K_{API}$ , e  $^{\circ}API$ , e é apropriado para frações de petróleo com VC de  $0,5 \text{ mm}^2/\text{s}$  a  $200 \text{ mm}^2/\text{s}$  a  $37,78 \text{ }^{\circ}\text{C}$  e  $0,3 \text{ mm}^2$  a  $40 \text{ mm}^2$  a  $98,89 \text{ }^{\circ}\text{C}$  (ABBOTT; KAUFMANN; DOMASH, 1971).

VC também pode ser obtida através do modelo de Beg e colaboradores empregando a temperatura de ebulição da fração do petróleo com 50% do volume evaporado (T50) e a gravidade API, caso a temperatura de ebulição do petróleo esteja entre  $93,33 \text{ }^{\circ}\text{C}$  a  $454,44 \text{ }^{\circ}\text{C}$  (BEG; AMIN; HUSSAIN, 1988). Beg e Amin também desenvolveram outros dois métodos para frações pesadas de petróleo, onde um modelo requer apenas T50 e outro modelo requer além de T50,  $^{\circ}API$  e massa molar da fração (AMIN; BEG, 1994).

Utilizando também T50, há o modelo de Fang Lei, que também requer outros parâmetros para calcular VC em qualquer temperatura, como massa específica a  $15,6^{\circ}\text{C}$  e massa molar (FANG; LEI, 1999).

Outra maneira de calcular VC em qualquer temperatura é utilizando a temperatura de ebulição e a densidade relativa a  $15,6 \text{ }^{\circ}\text{C}$ , conforme o modelo de Aboul-Seoud e Moharam (ABOUL-SEOUD; MOHARAM, 1999).

Através do modelo de Mehrotra é ainda mais acessível calcular VC utilizando apenas o ponto de ebulição médio (MEHROTRA; MONNERY; SVRCEK, 1996).

Por fim, há o modelo de Puttagunta e colaboradores que, diferente dos demais, requer a viscosidade cinemática a  $40 \text{ }^{\circ}\text{C}$  para calcular VC em qualquer temperatura. Esse modelo, que é recomendado pelo API – *American Petroleum Institute* - pode ser considerado um modelo de conversão de VC ao invés de predição (AMERICAN PETROLEUM INSTITUTE, 1997).

Assim, o presente estudo tem como objetivo verificar a acuracidade dos modelos empíricos para cálculo da viscosidade cinemática a partir de dados disponíveis na literatura relacionados à fração de petróleo na faixa da nafta leve. Dessa maneira, os resultados obtidos poderão auxiliar e sugerir modelos mais adequados para determinada fração de petróleo em diversas temperaturas, como  $20 \text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $40 \text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $50 \text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $100 \text{ }^{\circ}\text{C}$  e  $150 \text{ }^{\circ}\text{C}$ .

## **METODOLOGIA**

Para testar os modelos de predição de VC, utilizou-se 178 dados de VC de 46 *assays* da Exxon (EXXON MOBIL, 2020) envolvendo a nafta leve caracterizada pelas seguintes propriedades: densidade a  $15^{\circ}\text{C}$  de 0,64 a 0,70;  $^{\circ}API$  de 69,40 a 89,70; VC a  $20^{\circ}\text{C}$  de 0,50

mm<sup>2</sup>/s a 1,40 mm<sup>2</sup>/s; VC a 40°C de 0,40 mm<sup>2</sup>/s a 1,10 mm<sup>2</sup>/s; VC a 50°C de 0,40 mm<sup>2</sup>/s a 1,00 mm<sup>2</sup>/s; VC a 100°C de 0,30 mm<sup>2</sup>/s a 0,60 mm<sup>2</sup>/s; VC a 150°C de 0,20 mm<sup>2</sup>/s a 0,40 mm<sup>2</sup>/s; T10 de e 87,56 °C a 119,56 °C; T30 de e 92,21 °C a 136,73 °C; T50 de e 106,31 °C a 142,85 °C; T70 de e 123,47 °C a 148,34 °C; T90 de e 140,62 °C a 152,63 °C. Alguns parâmetros necessários para estimativa de VC também foram calculados, como:

- Ponto de ebulição médio mediano (PEME), considerando as temperaturas de destilação de fração de petróleo pelo método ASTM D86, como T10 (temperatura de destilação com 10% de volume evaporado), T30 (temperatura de destilação com 30% de volume evaporado), T50 (temperatura de destilação com 50% de volume evaporado), T70 (temperatura de destilação com 70% de volume evaporado), T90 (temperatura de destilação com 90% de volume evaporado)
- Fator de caracterização API,  $K_{API}$ , utilizando PEME e densidade a 15°C.

Por fim, para a avaliação dos modelos de predição de viscosidade cinemática foi utilizado como parâmetro o desvio absoluto médio – DAM (Eq.1), que considera a média do módulo da diferença entre a viscosidade cinemática experimental ( $y_e$ ) e a viscosidade cinemática calculada ( $y_c$ ) dividida pela viscosidade experimental. O desvio também foi expresso de forma percentual, %DAM, conforme Eq.2. Assim, o modelo com menor %DAM e DAM corresponde ao modelo com maior acuracidade e adequado para estimativa de VC.

$$DAM = \frac{\sum_{i=1}^N (|y_e - y_c|)}{N} \quad (1)$$

$$\%DAM = \frac{(\sum_{i=1}^N (|y_e - y_c|))/y_e}{N} \quad (2)$$

Alguns modelos não foram avaliados em algumas situações, uma vez que foram desenvolvidos para predição de VC em uma temperatura específica, como a equação de Beg e Amin que é adequada para estimativa de VC a 37,8 °C e o modelo de Beg e colaboradores que é apropriada para estimativa de VC a 98,8 °C. O modelo de Puttagunta que requer VC a 37,8 °C também não foi avaliado na estimativa de VC a 40°C.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para a avaliação dos modelos empíricos, foram calculados  $K_{API}$  e PEME, obtendo uma faixa de valores de 12,85 a 13,83 e 107,74 °C a 137,71 °C, respectivamente para frações de petróleo na faixa da nafta.

Para a predição de VC a 20 °C, 40 °C, 50 °C, 100 °C e 150 °C observou-se que para cada temperatura tem-se um modelo de estimativa de KV diferente com menor desvio. Para VC a 20°C, o menor desvio obtido (DAM=0,04 mm<sup>2</sup>/s e %DAM=6,73) foi aplicando o modelo de Puttagunta. Para VC a 40 °C e 50 °C, o modelo de Fang e Lei apresentou menores desvios, DAM=0,07 mm<sup>2</sup>/s (%DAM=13,05) e DAM=0,04 mm<sup>2</sup>/s (%DAM=7,80), respectivamente. Já para estimar VC a 100°C e 150 °C, observou ser mais apropriado utilizar os modelos de Abbot (DAM=0,02 mm<sup>2</sup>/s e %DAM=4,25) e Beg e colaboradores (DAM=0,05 mm<sup>2</sup>/s e %DAM=10,83), nas respectivas temperaturas.

Além de avaliar os modelos em cada temperatura, realizou-se também uma avaliação para identificar o modelo mais apropriado envolvendo várias temperaturas (20 °C, 50 °C, 100 °C e 150 °C). Como resultado, tem-se o modelo de Fang e Lei com menor desvio, DAM = 0,05 mm<sup>2</sup>/s e %DAM = 10,28. Com esse estudo, pode-se então aplicar um único modelo para estimar VC nestas temperaturas de modo a simplificar os cálculos necessários.

Para aumentar a acuracidade e facilitar o cálculo requerendo uma única propriedade facilmente disponível, VC a 40°C (mm<sup>2</sup>/s), desenvolveu-se um novo método de estimativa de VC a diferentes temperaturas (T) (20 °C, 50°C, 100 °C e 150 °C). Este método (Eq. 3, Eq. 3.1 e Eq. 3.2) foi obtido através do ajuste dos dados de nafta baseando-se no modelo de Puttagunta, utilizando VC a 40 °C. A Eq.3 apresentou no geral, ou seja, para todas as temperaturas, R<sup>2</sup> = 0,95, DAM = 0,03 mm<sup>2</sup>/s e %DAM = 8,45. Já utilizando Eq.3 para estimar VC a determinada temperatura tem-se: %DAM = 4,42 para VC a 20 °C; %DAM = 9,18 para VC a 50 °C; %DAM = 7,85 para VC a 100 °C e %DAM = 12,53 para VC a 150 °C.

$$\log (VC_{T^{\circ}C}) = A * \left( \frac{313,15}{T+273,15} \right)^B - 1,256397 \quad (3)$$

$$A = \log(VC_{40^{\circ}C}) + 1,256397 \quad (3.1)$$

$$B = 0,1 * \log(VC_{40^{\circ}C}) + 1,47415 \quad (3.2)$$

Para verificar a capacidade de predição do novo modelo, realizou-se um teste com 40 amostras de nafta leve diferentes das utilizadas no ajuste do novo modelo, com VC de 0,2 mm<sup>2</sup>/s a 0,7 mm<sup>2</sup>/s a 20°C, 50 °C, 100 °C e 150 °C. Como resultado do teste, observou-se uma predição satisfatória, apresentando-se os parâmetros R<sup>2</sup> = 0,93, DAM = 0,03 mm<sup>2</sup>/s e %DAM = 8,79.

## CONSIDERAÇÕES FINAIS

Para indicar métodos mais precisos de modo a contribuir nos cálculos de processo em refinarias, modelos empíricos de estimativa de viscosidade cinemática foram avaliados em diversas temperaturas utilizando dados de *assays* contendo frações de petróleo na faixa da nafta leve. Diversos modelos que requerem diferentes parâmetros para cálculos foram avaliados comparando-se o desvio absoluto médio – DAM e desvio absoluto médio percentual - %DAM resultantes.

Como resultado, observou-se que para cada temperatura, é necessário utilizar um modelo específico para obter resultados mais precisos. Além disso, considerando várias temperaturas, o modelo com menor desvio foi o de Fang e Lei, que utiliza T50, massa específica a 15,6°C e massa molar para o cálculo, com DAM = 0,05 mm<sup>2</sup>/s e %DAM = 10,28. Um novo método com menor desvio e que requer apenas a propriedade VC a 40°C foi desenvolvido para estimar VC em qualquer temperatura entre 20 °C a 150°C para nafta leve. O uso deste método, além de, no geral, gerar menor desvio do que os modelos já existentes (%DAM = 8,79), é também uma maneira de simplificar o número de métodos a serem aplicados em cálculos de engenharia para estimativa de VC em diferentes temperaturas. Além disso, é um método útil e de fácil aplicação ao requerer apenas uma única propriedade usualmente disponível para o cálculo de VC em determinada temperatura (VC a 40°C).

**Palavras-chave:** Nafta, Estimativa, Viscosidade, Petróleo, Temperatura.

## AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem o apoio financeiro do Programa de Recursos Humanos da Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis – PRH-ANP

## REFERÊNCIAS

ABBOTT, M. M.; KAUFMANN, T. G.; DOMASH, L. A correlation for predicting liquid viscosities of petroleum fractions. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, [S. l.], v. 49, n. 3, p. 379–384, 1971. DOI: 10.1002/cjce.5450490314.

ABOUL-SEOUD, Abdel Latif; MOHARAM, Hassan M. A generalized viscosity correlation for undefined petroleum fractions. **Chemical Engineering Journal**, [S. l.], v. 72, n. 3, p. 253–256, 1999. DOI: 10.1016/S1385-8947(98)00131-4.

AMERICAN PETROLEUM INSTITUTE. Technical Data Book American Petroleum Institute. **American Petroleum Institute**, [S. l.], 1997.

AMIN, Mohamed B.; BEG, Shafkat A. Generalized kinematic viscosity-temperature correlation for undefined petroleum fractions of ibp - 95°C to 455°C+ boiling ranges. **Fuel Science and Technology International**, [S. l.], v. 12, n. 1, p. 97–129, 1994. DOI: 10.1080/08843759408916168.

BEG, S. A.; AMIN, M. B.; HUSSAIN, I. Generalized kinematic viscosity-temperature correlation for undefined petroleum fractions. **The Chemical Engineering Journal**, [S. l.], v. 38, n. 2, p. 123–136, 1988. DOI: 10.1016/0300-9467(88)80068-6.

EXXON MOBIL. **Assays available for download | ExxonMobil**. 2020. Disponível em: <https://corporate.exxonmobil.com/Crude-oils/Crude-trading/Assays-available-for-download>. Acesso em: 22 jun. 2020.

FANG, Wenjun; LEI, Qunfang. Generalized correlation for predicting the kinematic viscosity of liquid petroleum fractions. **Fluid Phase Equilibria**, [S. l.], v. 166, n. 1, p. 125–139, 1999. DOI: 10.1016/S0378-3812(99)00298-8.

KIRKWOOD, John G.; BUFF, Frank P.; GREEN, Melvin S. The statistical mechanical theory of transport processes. III. The coefficients of shear and bulk viscosity of liquids. **The Journal of Chemical Physics**, [S. l.], v. 17, n. 10, p. 988–994, 1949. DOI: 10.1063/1.1747099.

KUPPUSAMY, Saranya; MADDELA, Naga Raju; MEGHARAJ, Mallavarapu; VENKATESWARLU, Kadiyala; KUPPUSAMY, Saranya; MADDELA, Naga Raju; MEGHARAJ, Mallavarapu; VENKATESWARLU, Kadiyala. An Overview of Total Petroleum Hydrocarbons. In: **Total Petroleum Hydrocarbons**. [s.l.] : Springer International Publishing, 2020. p. 1–27. DOI: 10.1007/978-3-030-24035-6\_1.

MEHROTRA, Anil K.; MONNERY, Wayne D.; SVRCEK, William Y. A review of practical calculation methods for the viscosity of liquid hydrocarbons and their mixtures. **Fluid Phase Equilibria**, [S. l.], v. 117, p. 344–355, 1996.

RIAZI, M. R. **Characterization and Properties of Petroleum Fractions**. 1. ed. West Conshohocken: ASTM International, 2005.

VISWANATH, D. ...; GHOSH, T.; PRASAD, D. H. L.; DUTT, N. V. K.; RANI, K. Y. **Viscosity of Liquids - Theory, Estimation, Experiment, and Data**. 1. ed. [s.l.] : Springer, 2007. DOI: 10.1007/978-1-4020-5482-2.