



T1005

**DESENVOLVIMENTO DE UM ALGORITMO PARA A CONSTRUÇÃO DE MOLÉCULAS REPRESENTATIVAS DE UMA MISTURA DE FRAÇÕES PESADAS DO PETRÓLEO**

Hugo Amaral Pacheco Chagas (Bolsista FAPESP) e Prof. Dr. José Roberto Nunhez (Orientador), Faculdade de Engenharia Química, FEQ, UNICAMP

Os estudos de rotas cinéticas representativas do craqueamento catalítico de frações de petróleo vêm sendo de grande relevância para as refinarias. Seus resultados são de interesse imediato, tendo em vista que os parâmetros cinéticos do sistema reacional são importantes para otimizar as condições de funcionamento do riser do FCC (*Fluid Catalytic Cracking*), maximizando a conversão dos produtos do processo de maior valor agregado. Este projeto de pesquisa visa construir, a partir de um modelo matemático/estatístico, um algoritmo capaz de calcular parâmetros que possibilitam a construção de um conjunto representativo de moléculas para misturas de frações do petróleo que entram no processo FCC. O programa se baseia em um sistema interativo, utilizando a linguagem Fortran, que cria um conjunto de moléculas representativas do petróleo a partir de parâmetros essenciais que caracterizam os grupos de moléculas presentes no petróleo. A determinação utiliza uma variação do método dos mínimos quadrados e executa uma minimização com relação às propriedades da mistura, que caracterizam o conjunto de moléculas sendo criado. O trabalho de caracterização da alimentação se encontra em fase final e o trabalho está sendo feito em conjunto com a PETROBRAS.

Moléculas representativas - Frações pesadas do petróleo - Modelo computacional