



# SIMULAÇÃO CFD DE JATOS EM DISTRIBUIDORES DE NAFTA EM REATORES DE HIDROTRATAMENTO (HDT)

**Palavras-Chave:** JATOS, HIDROTRATAMENTO DE NAFTA (HDT), DISTRIBUIDORES DE LÍQUIDO

**G. G. DE ALBUQUERQUE, P. E. M. PEREZ, M. R. M. PENTEADO e D. NORILER**

**Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química**

## **INTRODUÇÃO E OBJETIVO:**

A busca por combustíveis de melhor qualidade e que estejam dentro das especificações técnicas e ambientais se mostra uma demanda crescente, principalmente pela alta dependência que ainda existe de combustíveis de origem fóssil, como o diesel e a gasolina. Esses combustíveis podem apresentar concentrações elevadas de compostos sulfurados que entram em combustão e emitem SO<sub>x</sub>, compostos prejudiciais à saúde humana e ao meio ambiente. Por conta disso, há uma tendência no enrijecimento de legislações em diversos países para diminuir os teores de enxofre para a comercialização destes combustíveis (Stanislaus *et al.*, 2010). A nafta, fração do petróleo precursora do diesel e da gasolina, quando originada de processos como o coqueamento retardado pode conter elevadas concentrações de diolefinas (dienos) (Araújo, 2016). O alto teor de diolefinas é indesejado por aumentar a instabilidade da carga, favorecer a formação de coque (polimerização) e diminuir a qualidade do combustível.

O hidrotreatamento (HDT) é um processo presente nas refinarias de petróleo em que há a adição de hidrogênio a frações de petróleo com a finalidade de remover esses contaminantes de enxofre, assim como estabilizar essa carga por meio de uma hidrogenação seletiva de diolefinas ou olefinas. O hidrotreatamento (HDT) acontece em um reator catalítico o qual pode ser operado em duas formas principais: leito fixo ou leito fluidizado. Os reatores de leito fixo para o hidrotreatamento de diolefinas podem apresentar uma elevada complexidade de análise e otimização por conta da ocorrência simultânea de diversos fenômenos físicos, químicos e fluidodinâmicos. O uso de recursos computacionais para a descrição de sistemas desse tipo vem sendo cada vez mais utilizada (Heidari and Hashemabadi, 2014).

Nesses equipamentos busca-se comumente a otimização da distribuição de líquido sob o leito catalítico, pois a má distribuição de líquido compromete a molhabilidade do leito/catalisador e diminui a efetiva utilização do leito catalítico (Gunjal e Ranade, 2011). Portanto, o projeto do reator passa pelo *design* dos distribuidores de líquido e uma avaliação técnica de parâmetros relevantes, como a distância dos bocais de alimentação até a superfície do leito catalítico. A localização e *design* dos distribuidores de líquido também influencia na propriedade dos jatos e *sprays* (Lefebvre e McDonell, 2017), que por sua vez influenciam na

penetrabilidade da carga no leito, o campo de velocidade, tanto da região confinada quanto da região porosa, e influenciam também nas tensões normais e cisalhantes na superfície do leito, que podem causar o desarranjo das partículas, assim como deteriorá-las. Sendo assim, esse trabalho visa investigar e compreender os fenômenos fluidodinâmicos associados a influência da distância do bocal de alimentação do prato distribuidor de líquido até a superfície do leito poroso, aplicado a reatores de hidrotratamento de nafta, para as distâncias de 50 mm, 100 mm, 150 mm e 250 mm por meio de simulações utilizando ferramentas de fluidodinâmica computacional (CFD).

## METODOLOGIA:

Utilizou-se o Software ANSYS Design Modeler para modelar 4 geometrias 3D da região de interesse do reator, ou seja, a alimentação por meio do distribuidor de líquido (região destacada em vermelho na Figura 1). Gunjal e Ranade (2011) apresentam valores típicos de diâmetro de um reator de escala piloto (500 mm até 4000 mm) comparado com um reator de escala industrial (1000 mm até 4000 mm). O diâmetro do reator utilizado para realizar as simulações foi de  $D = 1600$  mm, composta de 133 bocais de alimentação de nafta (conforme a Figura 2) e uma região confinada entre os bocais de alimentação e a zona porosa de 50 mm, 100 mm, 150 mm e 250 mm para cada caso estudado. Para todas as quatro geometrias, também foi incluída uma região de 100 mm abaixo da região confinada, que se refere à parte inicial do leito poroso do reator, onde foi utilizada uma *User Define Function (UDF)* com a finalidade de se implementar um perfil de porosidade radial (Bazmi *et al.*, 2011).

Figura 1 – Representação do reator com destaque da região dos distribuidores e início do leito poroso

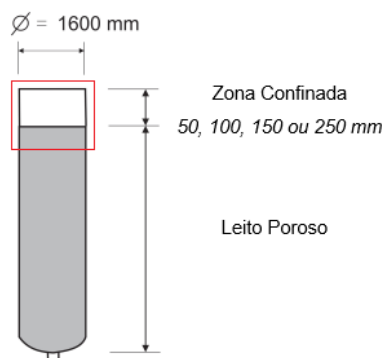
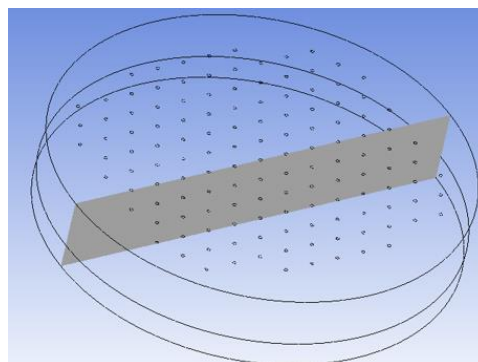


Figura 2 – Geometria do Reator com o plano de obtenção dos resultados



A partir das quatro geometrias, utilizou-se o Software ANSYS Meshing com a finalidade de se construir as malhas computacionais. Em todos os casos foram utilizados os métodos *Multizone* e *Sweep Method* para a construção de malhas tetraédricas, que foram escolhidas devido à complexidade da geometria. Foi feita a conversão das malhas tetraédricas em malhas poliédricas por meio da ferramenta *Make Polyhedra* no Software ANSYS Fluent e aumento da qualidade das malhas, sobretudo da ortogonalidade, por meio da ferramenta *Improve Quality*.

O *solver* utilizado para os cálculos numéricos e solução das equações de conservação da massa e de momento foi o Software ANSYS Fluent. As simulações foram realizadas para uma geometria tridimensional e um modelo isotérmico, sem transferência de massa e reação química, por se tratar de uma avaliação

exclusivamente fluidodinâmica dos distribuidores de líquido e a influência da distância dos bocais até o leito poroso. Para o *setup* foram utilizadas como condição iniciais a vazão mássica de nafta ( $m = 22 \text{ kg/s}$ ) nos bocais do prato distribuidor, pressão de operação de  $P = 1847,3 \text{ kPa}$ , condição de não deslizamento nas paredes e *outlet* de fluido pela base da geometria,  $100 \text{ mm}$  abaixo do início do leito poroso. Utilizou-se propriedades físicas constantes de viscosidade da nafta  $\mu = 1,501 \cdot 10^{-5} \text{ Pa.s}$  e massa específica de  $\rho = 635 \text{ kg/m}^3$ . Para o tratamento dos resultados utilizou-se recursos do Software ANSYS CFX Post, onde foram criados linhas, planos axiais e radiais (conforme a Figura 2) para se plotar as tensões e os perfis, vetores e contornos de velocidades.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO:

Foi feita uma avaliação das características qualitativas dos jatos na alimentação que ocorre na superfície do leito. Plotou-se no plano destacado da Figura 2 mapas com os contornos de velocidade de cada um dos quatro casos estudados, conforme mostrado pela Figura 3. Em cada um dos 4 mapas existe uma linha preta horizontal que representa a interface entre a zona confinada e o início do leito poroso.

Figura 3 – Mapa de contorno de velocidade dos *sprays*

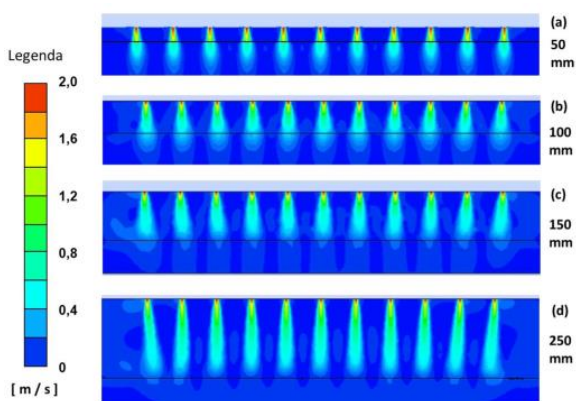
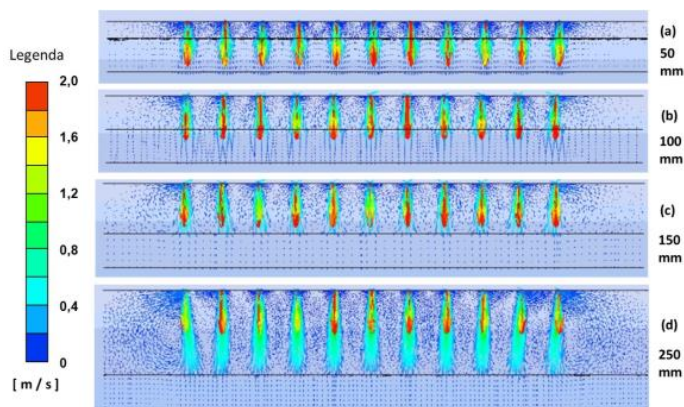


Figura 4 – Mapa de vetores de velocidade dos *sprays*



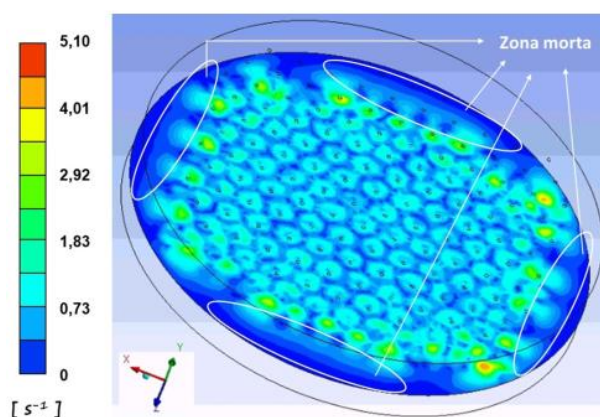
Pode-se observar que o ângulo de cone formado pelos jatos de nafta aumenta conforme se diminui a distância entre os bocais e o leito. Segundo Lefevre e McDonell (2017), a penetração do jato no meio é inversamente proporcional ao ângulo de cone do spray, por conta disso, pode-se dizer que há uma maior penetrabilidade do jato para os casos em que há uma maior distância entre os bocais e o leito, como para a distância de  $250 \text{ mm}$ . Para reatores de hidrotreatamento é interessante que haja uma distribuição de líquido eficiente, que está diretamente relacionada com a penetrabilidade dos jatos neste caso. Além disso, a partir desse contorno de velocidade também pode-se notar que quanto maior a distância dos bocais até o início do leito poroso, maior é a instabilidade dos jatos periféricos (próximos a parede do reator), possivelmente em decorrência da formação de vórtices e zonas turbulentas nessa região. Uma forma mais adequada de se investigar esse comportamento e avaliar qualitativamente os perfis e campos de velocidade na zona confinada, sobretudo dos jatos periféricos, é por meio dos vetores de velocidade, conforme apresentado pela Figura 4.

Pela perspectiva dos vetores de velocidade pode-se notar que de fato, entre  $100 \text{ mm}$  e  $150 \text{ mm}$ , se inicia a formação de vórtices nas proximidades da parede do reator e que se acentua com o aumento da distância,

conforme pode ser observado na Figura 4 (d), para a distância de 250 mm. A formação de vórtices nas proximidades da parede se deve a distribuição dos bocais no prato distribuidor e notou-se que também é influenciado pela distância entre os bocais e o leito. Essa condição pode possivelmente aumentar as tensões cisalhantes sobre a superfície do leito próximo a parede, causando um desarranjo das partículas, prejudicando o empacotamento do leito e eventualmente causar a lixiviação das partículas.

Foi feito um estudo do perfil de tensões viscosas na superfície do leito com a finalidade de se identificar possíveis pontos críticos. A tensão viscosa é função da viscosidade da nafta e do tensor taxa de deformação. A partir das simulações pode-se obter os gradientes de velocidade, que por sua vez são utilizados para o cálculo da taxa de deformação e tensões na superfície do leito. A Figura 5 apresenta o perfil da taxa de deformação na superfície do leito.

Figura 5 – Contorno da taxa de deformação na superfície do leito poroso



Pode-se observar que a taxa de deformação nas regiões abaixo dos *sprays* periféricos do reator chega a ao valor médio de  $5 s^{-1}$ , enquanto as regiões centrais apresentam valores médios de  $1 s^{-1}$  e as regiões nas proximidades da parede encontram-se com valores próximos a  $0 s^{-1}$ . Esse resultado confirma a hipótese levantada anteriormente com respeito a formação de vórtice dos jatos periféricos pudessem causar maiores tensões cisalhantes quando comparados aos jatos centrais. Além disso, fica evidente que para essa geometria e disposição de bocais, existem de zonas mortas nas proximidades das paredes. Sabe-se também que quanto mais próximo os bocais estão do leito, maiores são as tensões normais na superfície do leito. Portanto, pode-se concluir que em distâncias menores as tensões normais se sobressaem com relação as tensões cisalhantes e conforme se aumenta a distância entre os bocais e o leito se diminui as tensões normais e se aumenta as tensões cisalhantes.

Buscando entender o perfil de velocidade axial de um único bocal no centro do prato distribuidor, plotou-se um gráfico de velocidade em função da altura desde o bocal de alimentação até 100 mm abaixo do leito catalítico para cada uma das quatro geometrias, conforme a Figura 6. Verifica-se que para todos os casos a alimentação do jato ocorre com pouco mais de 2 m/s. Nota-se que a velocidade que o jato incide no leito decresce significativamente até 150 mm, após isso a velocidade de incidência do jato na superfície do leito não diminui de maneira considerável, conforme apresentado pela Tabela 1.

Figura 6 – Velocidade do *spray* desde o bocal até o leito

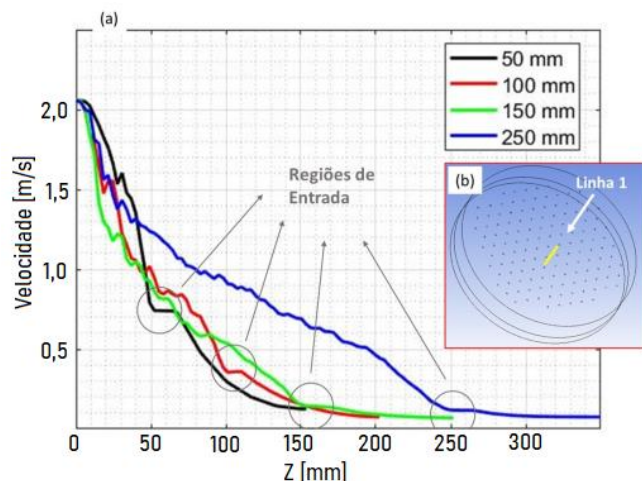


Tabela 1 – Velocidade de Incidência dos jatos

Geometria	Velocidade de incidência na superfície do leito [m/s]
50 mm	0,75
100 mm	0,35
150 mm	0,17
250 mm	0,14

## CONCLUSÕES:

Verificou-se que a penetrabilidade da carga no leito poroso aumenta para as geometrias com maiores distâncias entre os bocais e o leito por conta da diminuição do ângulo de cone dos jatos. Esse aumento na distância também resulta na formação de vórtices e zonas turbulentas dos jatos periféricos aumentando as tensões cisalhantes nestes locais. Por outro lado, as tensões normais na superfície e a velocidade de incidência do jato no leito aumentam conforme os bocais se aproximam da interface porosa, além de se aumentar as zonas mortas nas proximidades das paredes. Desse modo, verifica-se que a distância adequada dos bocais até a superfície do leito seja uma posição intermediária de *150 mm* que minimiza os fenômenos indesejados dos casos extremos.

## BIBLIOGRAFIA

- ARAÚJO, A.F.D. Modelagem matemática e simulação computacional do reator de conversão de diolefinas e do reator de hidrotratamento de nafta. **Dissertação de Mestrado**, 2016.
- BAZMI, M.; HASHEMABADI, S. BAYAT, M. CFD simulation and experimental study for two-phase flow through the trickle bed reactors, sock and dense loaded by trilobe catalysts. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, v. 38, n. 3, p. 391–397, mar 2011.
- HEIDARI, A. and HASHEMABADI, S.H. Cfd simulation of isothermal diesel oil hydrodesulfurization and hydrodearomatization in trickle bed reactor. **Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers**, v. 45, n. 4, 1389-1402, 2014.
- LEFEBVRE, A.H. and MCDONELL, V.G. **Atomization and sprays**. CRC press, 2017.
- RANADE, V.V.; CHAUDHARI, R. e GUNJAL, P.R. **Trickle bed reactors: Reactor engineering and applications**. Elsevier, 2011.
- STANISLAUS, A.; MARAFI, A. RANA, M. S. Recent advances in the science and technology of ultra low sulfur diesel (ULSD) production. **Catalysis Today**, v. 153, n. 1-2, p. 1–68, jul 2010.

## AGRADECIMENTOS:

O autor agradece a Petrobras (Termo de Cooperação 5900.0112819.19.9) e o PRH/ANP pelo apoio e fomento à pesquisa dentro da universidade e o auxílio financeiro prestado ao bolsista.