

## Otimização do Processo de Hidrogenação Seletiva de MAPD em Reator Trickle Bed Usando CFD

Emerentino Quadro (doutorando – MCTI), [emerentino.quadro@braskem.com](mailto:emerentino.quadro@braskem.com)  
 Ivan C. da Cunha Lima (Co-orientador), [ivandacunhalima@gmail.com](mailto:ivandacunhalima@gmail.com)  
 Lilian Lefol Nani Guarieiro (orientadora – MCTI), [lilian.guarieiro@fieb.org.br](mailto:lilian.guarieiro@fieb.org.br)

Palavras Chave: Reator trickle bed; CFD; Hidrogenação de MAPD; Simulação de reatores.

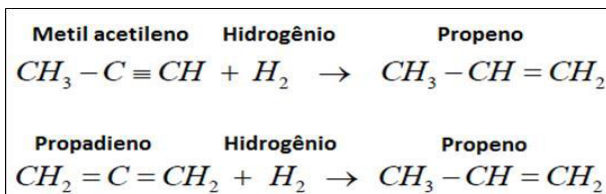
### Introdução

Reatores *trickle bed* são atualmente uma opção muito utilizada para hidrogenação de hidrocarbonetos, isto devido à sua capacidade de dissipação térmica e lavagem de oligômeros formados na reação.

O recente desenvolvimento dos recursos computacionais proporcionou a oportunidade de aplicação da CFD (*Computational Fluid Dynamics*) na modelagem e otimização dos reatores. CFD é uma ferramenta de aplicação interdisciplinar<sup>1</sup> e é rotineiramente empregada nos campos da aeronáutica, turbomáquinas, automobilismo, projetos de navio, meteorologia, oceanografia, astrofísica, recuperação de óleo, medicina, modificação de equipamentos industriais, filmes de animação e também em arquitetura.

Esta investigação visa modelar um sistema de hidrogenação seletiva de MAPD (Metil Acetileno e Propadieno) com o intuito de identificar as condições ótimas de operação.

**Figura 1.** Reações de hidrogenação seletiva de MAPD.



Foi utilizado o pacote de software da Ansys, código comercial amplamente utilizado e testado em diversas aplicações.

### Resultados e Discussão

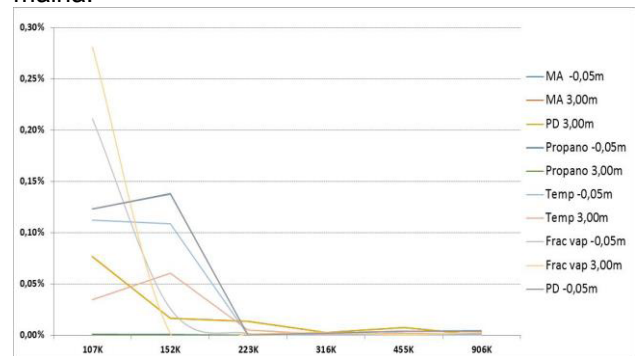
As malhas geradas foram trabalhadas para atender aos seguintes parâmetros:

Razão de aspecto: >0,40      Ângulo mínimo: >18  
 Qualidade ortogonal: >0,50      Deformação: <0,60

Seminário Anual de Pesquisa - 2016

O teste de sensibilidade (Figura 2) das principais variáveis de interesse em relação ao tamanho da malha mostrou que uma malha com 152 mil células atende aos erros requeridos.

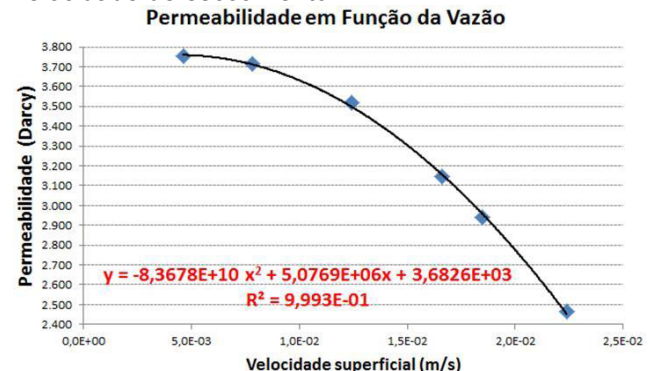
**Figura 2.** Resultados dos testes de sensibilidade de malha.



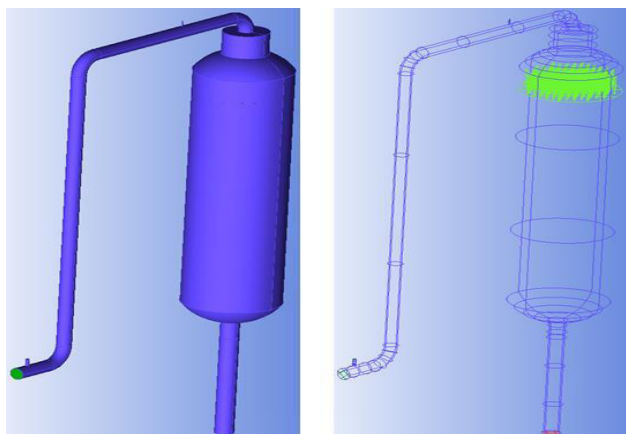
Visando representar corretamente o diferencial de pressão de escoamento e dispersão no meio poroso, foram conduzidos ensaios laboratoriais para identificar a permeabilidade de Darcy. Identificou-se uma relação entre o valor da permeabilidade e a velocidade de escoamento do fluido.

A geometria foi discretizada e desenvolvidas as UDF's (*User Defined Functions*), códigos em C, para inserir mecanismos de reação e mecanismos de transferência de massa na simulação CFD.

**Figura 3.** Permeabilidade de Darcy em função da velocidade de escoamento.



**Figura 4.** Geometria representativa do domínio investigado.



#### Trabalhos publicados:

QUADRO, EMERENTINO BRAZIL; GUARIEIRO, LILIAN LEFOL NANI. Fatores Impactantes e Limitações da Metodologia Utilizada para Avaliação da Eficiência Energética mais Usada pelas Plantas de Produção de Eteno. In: IV Workshop de Pesquisa Tecnologia e Inovação, Salvador-BA, 2014.

QUADRO, EMERENTINO BRAZIL; SANTOS, CARLOS CESAR RIBEIRO. Decifrando Bach Através do Uso de Redes Complexas. In: CASI- Congresso de Administração, Sociedade e Inovação, Rio de Janeiro-RJ, 2014.

QUADRO, EMERENTINO BRAZIL; COSTA, AMANDA DE CARVALHO; WEISSHEIMER, FLAVIO; HOOD, DAVID; LINK, JOHN; SILVA, HENRIQUE. Minimizing Fouling in Ethylene Primary Fractionators. In: AIChE Spring Meeting - EPC Conference, Austin - TX, USA, 2015.

QUADRO, EMERENTINO BRAZIL; QUEIROZ, LEANDRO B.; GUARIEIRO, LILIAN LEFOL NANI. Medição e Análise da Permeabilidade de Leitos Catalíticos. In: V Workshop de Pesquisa Tecnologia e Inovação, Salvador-BA, 2015.

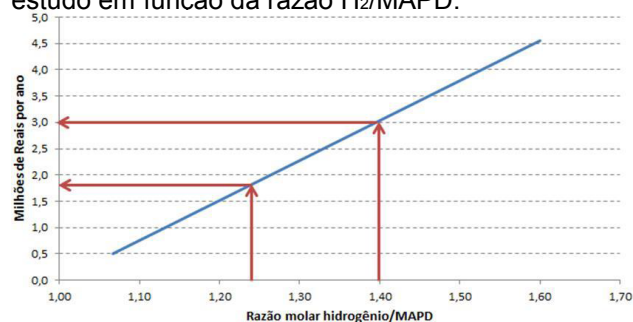
#### Trabalhos submetidos:

QUADRO, EMERENTINO BRAZIL; GUARIEIRO, LILIAN LEFOL NANI. *Modelagem Matemática Aplicada a Problemas nas Engenharias*, Volume IV. Capítulo: Aplicação de CFD em Processos Petroquímicos de Hidrogenação Seletiva de MAPD. Editora UNIJUI. 2015.

QUADRO, EMERENTINO BRAZIL; BEZERRA, LEANDRO; GUARIEIRO, LILIAN LEFOL NANI. Knock Out Drum Performance Enhanced by Feed Distributor Designed with CFD Assistance Anais da Academia Brasileira de Ciências. 2015.

O ganho potencial deste projeto pode chegar a 1,2 milhões de reais por ano.

**Figura 5.** Ganho da otimização do sistema em estudo em função da razão  $H_2$ /MAPD.



## Conclusões

O projeto de tese "Otimização do Processo de Hidrogenação Seletiva de MAPD em Reator Trickle Bed Usando CFD", iniciado em fevereiro de 2014, tem se desenvolvido conforme planejamento.

Como conclusões preliminares desta pesquisa, pudemos identificar um modelo que representa o escoamento no meio poroso em estudo e definir a discretização ótima do domínio em estudo.

Conclui-se que o escoamento no meio poroso em estudo é não darciniano na faixa de variação de velocidade, isto é, a permeabilidade não é constante, mas varia com o número de Reynolds.

## Referências

- MAVRIPPLIS, C. Interdisciplinary CFD. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, v. 26, n. 6-8, p. 333-335, jul. 2012.
- RANADE, V. V. *Computational flow modeling for chemical reactor engineering*. 1. ed. San Diego: Academic Press, 2002.
- ZIKA NOV, O. *Essential computational fluid dynamics*. 1. ed. New Jersey: John Wiley & Sons, 2010.
- BLAZEK, J. *Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications*. First Edit ed., 2001.
- DIXON, A. G.; NIJEMEISLAND, M. CFD as a Design Tool for Fixed-Bed Reactors. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 40, n. 23, p. 5246-5254, 2001.
- KOLACZKOWSKI, S. T. et al. Application of a CFD Code (FLUENT) to Formulate Models of Catalytic Gas Phase Reactions in Porous Catalyst Pellets. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 85, n. 11, p. 1539-1552, jan. 2007.