

Título: UMA ABORDAGEM BASEADA EM TERMODINÂMICA DE MISTURAS CONTÍNUAS VISANDO À SIMULAÇÃO DE REATORES ADIABÁTICOS MULTI-ESTÁGIO PARA HIDROTRATAMENTO DE DIESEL

Autores: José Luiz de Medeiros^{1*}, Ofélia de Queiroz F. Araújo¹ and Raissa M. Cotta F. Silva²,

Instituições .: ^{1*}Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, Brasil, ilm@eq.ufrj.br
²Centro de Pesquisas Leopoldo A. Miguez de Mello, Petróleo Brasileiro S.A., raissa@cenpes.petrobras.com.br

Devido ao continuamente crescente grau de exigência da regulamentação ambiental de combustíveis, torna-se progressivamente maior a fração de correntes hidrotratadas na formação do "pool" de óleo diesel. Também é crescente o grau de severidade aplicado nos processos de hidrotratamento, tendo em vista o constante aprimoramento de catalisadores e tecnologias de processo. Por outro lado, é perceptível a tendência de queda da qualidade do diesel não-tratado como resultado da crescente oferta de crús de inferior qualidade no mercado de petróleo. A consequência óbvia é que as plantas de refino estão continuamente expostas à redução de margens de lucro, acarretando que tais processos devam, cada vez mais, observar estrita proximidade a condições de otimalidade econômica. A programação e projeto ótimos de processos de refino demandam, por sua vez, recursos para precisa descrição matemática e modelagem fenomenológica. Por fim, cabe citar que cortes de diesel são misturas complexas de espécies parafínicas, aromáticas e naftênicas, todas ocorrendo em ampla faixa de distribuição de peso molecular, que demandam hidrotratamento (HDT) visando a elevar a razão hidrogênio/carbono e eliminar compostos indesejáveis como olefinas, aromáticos policondensados e espécies cuja combustão é agressiva ao meio ambiente por conterem enxôfre e nitrogênio. Adicionalmente, o óleo diesel, seja tratado ou não, deve atender elevado número de especificações que também acarretam o uso de técnicas de predição relacionadas com modelos termodinâmicos e estimação de propriedades físicas. Todos estes aspectos demandam, em última análise, precisa descrição composicional de cargas de HDT de diesel, juntamente com modelagem eficiente do reator correspondente.

Neste trabalho é abordada a modelagem e simulação estacionária de reatores industriais heterogêneos para HDT de diesel, com base nos seguintes pontos : (i) Modelagem composicional de cargas de HDT via definição de conjunto discreto de famílias contínuas de espécies, cada família caracterizada por compostos com uma mesma sub-estrutura funcional; (ii) Estimação de parâmetros do modelo composicional via reconciliação com dados de caracterização do óleo em questão; (iii) Proposição de rede de reações químicas de HDT operando sobre os *continua* de espécies reagentes e produtos, incluindo interações de adsorção com o catalisador e permitindo a influência do peso molecular na cinética de hidrogenação; (iv) Modelagem de reatores industriais adiabáticos em multi-leito e alta pressão, admitindo múltiplos pontos de injeção de hidrogênio.

A partir da descrição composicional de uma carga e dos parâmetros operacionais do processo, o reator pode ser simulado através de resolução numérica do seu modelo estacionário. Os resultados são diversos perfis de propriedades ao longo do reator tais como temperatura, fração vaporizada do óleo, funções distribuição de espécies em fases líquida e vapor, e típicos dados de caracterização de frações de petróleo como densidade 15C/15C e pontos de curvas de destilação.