

Desenvolvimento de um Bloco de Hidrodessulfurização para Simulação de Reatores Trickle-Bed

Arianne Barros^{a*}, Antônio Tavernard^a, Sérgio Mauro da Silva Neiro^b, Thiago Vaz da Costa^b, Heleno Bispo^a

^aUnidade Acadêmica de Engenharia Química, Universidade Federal de Campina Grande (UFCG), Campina Grande, Brasil

^b Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de Uberlândia (UFU), Uberlândia, Brasil

*arianne.barros@eq.ufcg.edu.br

RESUMO

A hidrodessulfurização (HDS) é uma das principais tecnologias empregadas no refino de petróleo para remoção de compostos sulfurados presentes em frações petrolíferas, por meio de reações catalíticas de hidrogenação conduzidas sob condições operacionais controladas. Diante da crescente complexidade dos processos industriais, a indústria do petróleo tem demandado ferramentas capazes de aumentar a eficiência operacional e apoiar a tomada de decisão. Nesse contexto, tecnologias associadas à Indústria 4.0 possibilitam o desenvolvimento de modelos digitais para análise e otimização de processos. Assim, este trabalho tem como objetivo desenvolver um bloco reacional de hidrodessulfurização utilizando o simulador comercial *Aveva Process Simulation (APS®)*, com aplicação de modelos termodinâmicos rigorosos disponíveis na plataforma. O estudo integra uma pesquisa voltada à modelagem detalhada de um reator trickle-bed de hidrotratamento (HDT) e adota o conceito de digital twin visando futuras aplicações em monitoramento, controle e otimização de processos. O modelo foi implementado a partir de um modelo cinético fenomenológico previamente validado e comparado com dados da literatura, contribuindo para a representação do comportamento reacional do processo em ambiente de simulação.

Palavras-chave: Hidrodessulfurização, Simulação de Processos, Digital Twin, Reator Trickle-Bed.

1. Motivação

O processo de refino de petróleo tem evoluído continuamente em resposta a demandas econômicas e ambientais. A necessidade de combustíveis com melhor desempenho e menor impacto ambiental impulsionou o desenvolvimento de diversas tecnologias de tratamento e conversão nas refinarias. Entre os principais desafios do setor está a remoção de impurezas presentes nas frações de petróleo, como compostos contendo enxofre, nitrogênio e metais, que comprometem a qualidade dos combustíveis e podem causar danos aos equipamentos e aos catalisadores utilizados em etapas subsequentes do refino (Szklo, 2012).

Os compostos sulfurados, em particular, representam um problema relevante, pois sua combustão contribui para a formação de poluentes atmosféricos, como dióxido de enxofre, associado à chuva ácida e a outros impactos ambientais (Saha, 2020). Nesse contexto, o processo de hidrodessulfurização (HDS) tornou-se uma das tecnologias mais utilizadas nas refinarias para remoção de enxofre de correntes petrolíferas (Mendez et al., 2017). Esse processo consiste em reações catalíticas de hidrogenação conduzidas sob altas temperaturas e pressões, nas quais compostos organossulfurados são convertidos em hidrocarbonetos livres de enxofre e sulfeto de hidrogênio (Barros et al., 2020).

Devido à crescente complexidade das operações de refino, ferramentas de modelagem e simulação têm se tornado essenciais para análise, otimização e suporte à tomada de decisão. Nesse contexto, tecnologias associadas à Indústria 4.0, como o conceito de Digital Twin, vêm sendo aplicadas para representar virtualmente processos industriais, permitindo análises avançadas de desempenho e estratégias de controle (Pereira et al., 2025). Assim, este trabalho tem como objetivo desenvolver um bloco reacional de hidrodessulfurização em ambiente de simulação comercial *APS®*, baseado em um modelo fenomenológico previamente validado para reatores trickle-bed de hidrotratamento. O modelo desenvolvido busca representar o comportamento reacional do processo e estabelecer bases para futuras aplicações relacionadas ao monitoramento, controle e otimização do processo por meio do conceito de *digital twin*.

2. Metodologia

2.1. Modelagem do reator de hidrodesulfurização (HDS)

O processo de hidrodesulfurização ocorre tipicamente em reatores de leito fixo do tipo trickle-bed, nos quais uma corrente líquida de óleo e uma corrente gasosa rica em hidrogênio escoam através de um leito catalítico sólido, formando um sistema trifásico gás-líquido-sólido. A modelagem desse tipo de reator constitui um desafio devido à presença simultânea de fenômenos de transferência de massa, reações químicas e efeitos hidrodinâmicos (Ancheyta et al., 2016).

Neste trabalho, o modelo utilizado foi baseado no modelo fenomenológico proposto por Neto et al. (2020), que descreve o comportamento de reatores de hidrotratamento considerando mecanismos de transferência de massa entre as fases e a cinética das reações envolvidas. O modelo matemático considera balanços de massa para as fases gasosa e líquida, incluindo transferência de massa gás-líquido e líquido-sólido, além das taxas de reação que ocorrem na superfície do catalisador. Os balanços de massa para os componentes da fase gasosa, para os componentes gasosos dissolvidos na fase líquida e para os componentes não voláteis presentes na fase líquida podem ser matematicamente expressos pelas Equações (1), (2) e (3), respectivamente:

$$\frac{u^G}{RT} \frac{dp_i^G}{dz} + k_i^L a^L \left(\frac{p_i^G}{H_i} - C_i^L \right) = 0 \quad (1)$$

$$u^L \frac{dC_i^L}{dz} - k_i^L a^L \left(\frac{p_i^G}{H_i} - C_i^L \right) + k_i^S a^S (C_i^L - C_i^S) = 0 \quad (2)$$

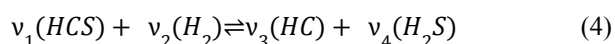
$$u^L \frac{dC_i^L}{dz} + k_i^S a^S (C_i^L - C_i^S) = 0 \quad (3)$$

Para simplificação do modelo, foram adotadas as seguintes hipóteses:

- operação adiabática do reator;
- temperatura uniforme entre as fases;
- ausência de desativação do catalisador;
- molhamento completo das partículas catalíticas;
- reações ocorrendo na superfície e nos poros do catalisador.

2.2. Cinética da reação HDS

No processo de hidrotratamento ocorrem diversas reações simultâneas envolvendo diferentes tipos de impurezas presentes no petróleo. Entretanto, neste trabalho foi considerada apenas a reação de hidrodesulfurização, representada de forma simplificada por um único pseudo-componente contendo enxofre. A reação global pode ser descrita pela conversão de um hidrocarboneto sulfurado (HCS) em um hidrocarboneto livre de enxofre (HC), com formação de sulfeto de hidrogênio (H_2S), na presença de hidrogênio molecular, conforme mostra a Equação (4), abaixo:



O modelo cinético adotado baseia-se no mecanismo de Langmuir-Hinshelwood, que assume caráter exotérmico e irreversível da reação em questão, sob condições normais de operação (Chowdhury et al., 2002). A taxa de reação depende das concentrações de hidrogênio e compostos sulfurados, sendo inibida pela presença de sulfeto de hidrogênio adsorvido na superfície do catalisador, podendo ser representada pela Equação (5):

$$r_{HDS} = \frac{k_{app} C_S^{0.5} C_{H_2}}{1 + K_{ads}^{H_2S} C_{H_2S}} \quad (5)$$

As informações sobre o modelo cinético e os valores utilizados na reação de hidrodesulfurização podem ser encontradas em Neto et al. (2020). As condições de contorno bem como todas as equações necessárias para o

cálculo das propriedades físico-químicas e dos parâmetros dos modelos foram baseadas em correlações disponibilizadas na literatura (Korsten e Hoffman, 1996; Neto, 2013; Soares, 2022).

3. Resultados

3.1. Desenvolvimento do bloco customizado de hidrodessulfurização

O modelo matemático foi implementado no ambiente de simulação comercial *APS®*, com o objetivo de desenvolver um módulo capaz de representar o comportamento do processo de hidrodessulfurização em um reator do tipo trickle-bed. O modelo, previamente avaliado quanto à sua consistência, incorpora equações cinéticas, fenômenos de transferência de massa e propriedades físico-químicas relevantes para a descrição do sistema.

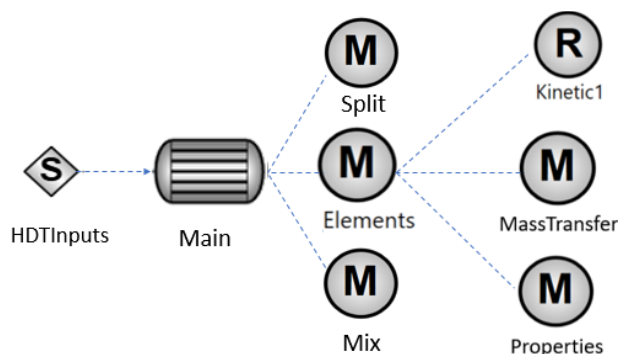
O desenvolvimento do bloco reacional foi realizado de forma incremental ao longo de diferentes versões do modelo. Na etapa inicial foi criado um bloco único contendo todas as equações do modelo, incluindo expressões cinéticas, correlações para cálculo das propriedades físico-químicas, coeficientes de transferência de massa e condições de contorno. Essa implementação inicial teve como objetivo compreender a estrutura de definição de variáveis e parâmetros no simulador e verificar a consistência dos resultados.

Com o avanço do desenvolvimento, foram realizadas modificações estruturais para melhorar a organização do modelo. Inicialmente, a parte cinética foi separada em um bloco específico responsável pelo cálculo da taxa de reação, enquanto o bloco principal passou a concentrar as equações de balanço. Nas etapas seguintes, explorou-se a comunicação entre blocos e submodelos, permitindo a construção de uma estrutura modular. Com isso, foi incorporado o conceito de discretização do reator em elementos, possibilitando representar a evolução das variáveis ao longo do leito catalítico.

Na versão final, o modelo foi reorganizado em submodelos específicos para cinética de reação, propriedades físico-químicas e coeficientes de transferência de massa, além de módulos auxiliares para definição das condições de entrada e manipulação das correntes do processo. Essa configuração resultou em um bloco compatível com a arquitetura do simulador capaz de representar o comportamento do processo de hidrodessulfurização em ambiente de simulação.

A arquitetura final do bloco reacional de hidrodessulfurização implementado no simulador é apresentada na Figura 1. A estrutura mostrada é resultado do processo de desenvolvimento e refinamento do modelo ao longo das diferentes versões implementadas, nas quais foram progressivamente incorporados submodelos responsáveis pela cinética de reação, transferência de massa e cálculo das propriedades físico-químicas, além dos elementos responsáveis pela discretização do reator ao longo de seu comprimento e da criação do fluido utilizado no processo. A consolidação dessa estrutura permitiu a construção de um módulo de simulação capaz de representar o comportamento do processo de hidrodessulfurização em ambiente computacional.

Figura 1. Arquitetura final do bloco reacional de hidrodessulfurização implementado no *APS®*.

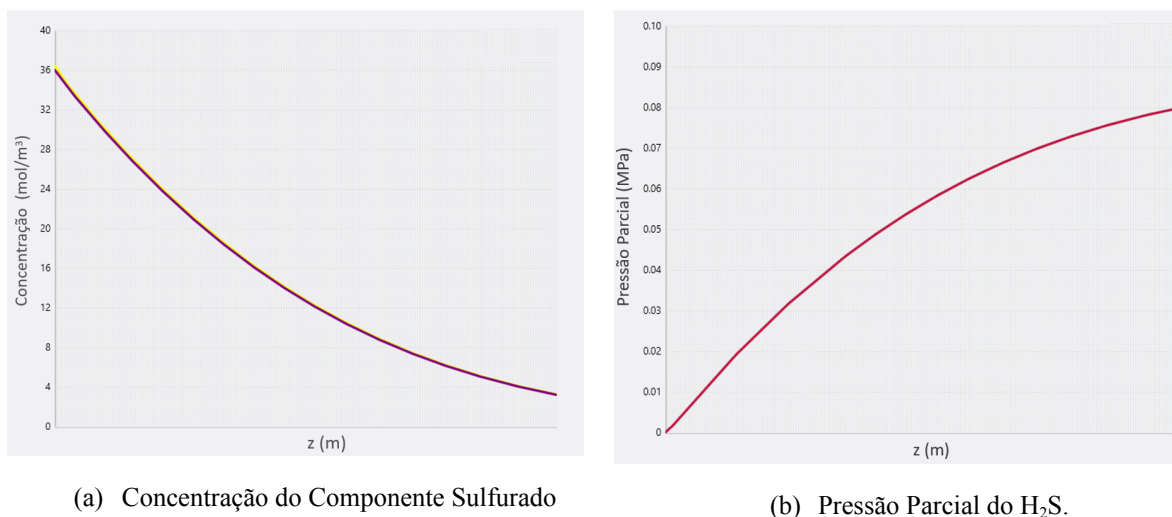


3.2. Resultados obtidos

A partir da implementação da versão final do bloco reacional de hidrodessulfurização no simulador *APS*[®], foram realizadas simulações com o objetivo de avaliar a capacidade do modelo em representar o comportamento do processo ao longo do reator. Os resultados obtidos foram comparados com dados experimentais disponíveis na literatura (Korsten e Hoffmann, 1996; Neto et al., 2020), permitindo verificar a consistência do modelo implementado. Nesta seção são apresentados os principais perfis das variáveis de interesse ao longo do reator, bem como a análise do comportamento do sistema frente às condições operacionais consideradas.

A Figura 2 apresenta a concentração do componente sulfurado ao longo do reator e sua respectiva pressão parcial à medida em que a reação acontece. A concentração do componente sulfurado obtida na saída do reator foi de, aproximadamente, 1.64 mol/m³. A pressão parcial de H₂S obtida na saída do reator foi de, aproximadamente, 0.084 MPa. Os resultados obtidos a partir da implementação do modelo de reator de HDS no *APS*[®] demonstraram concordância satisfatória com os resultados obtidos por Pereira Neto (2013), validados experimentalmente por Korsten e Hoffmann (1996).

Figura 2. Perfis de concentração e pressão parcial ao longo do reator.



Na Figura 3 pode-se observar o comportamento dos balanços de massa dos componentes gasosos na fase líquida, ao longo do comprimento do reator. O primeiro resultado é referente ao componente H₂S, no qual a curva vermelha representa o resultado do produto entre o coeficiente de transferência de massa desse componente na interface líquido-sólido e a diferença entre os valores das concentrações desse componente na fase líquida e na superfície do catalisador, isto é, $k_{sa}(C^L - C^S)$; a curva lilás, por sua vez, representa o produto entre o coeficiente de transferência de massa desse componente na interface gás-líquido e a diferença das concentrações anteriormente mencionadas, isto é, $k_{la}(C_{eq}^L - C^L)$. A Figura 3(b) mostra o comportamento desse produto para o componente H₂, sendo a curva laranja referente à transferência de massa na interface gás-líquida e a curva verde, à transferência de massa na interface líquido-sólido.

Para avaliar a capacidade preditiva do modelo, os resultados obtidos foram comparados com dados experimentais reportados por Korsten e Hoffmann (1996). Na Figura 4, observa-se boa concordância entre os perfis obtidos na simulação e os dados da literatura, indicando que o modelo implementado é capaz de representar adequadamente o comportamento do processo nas condições analisadas.

Figura 3. Transferência de massa da fase líquida para (a) H_2S ; (b) H_2 .

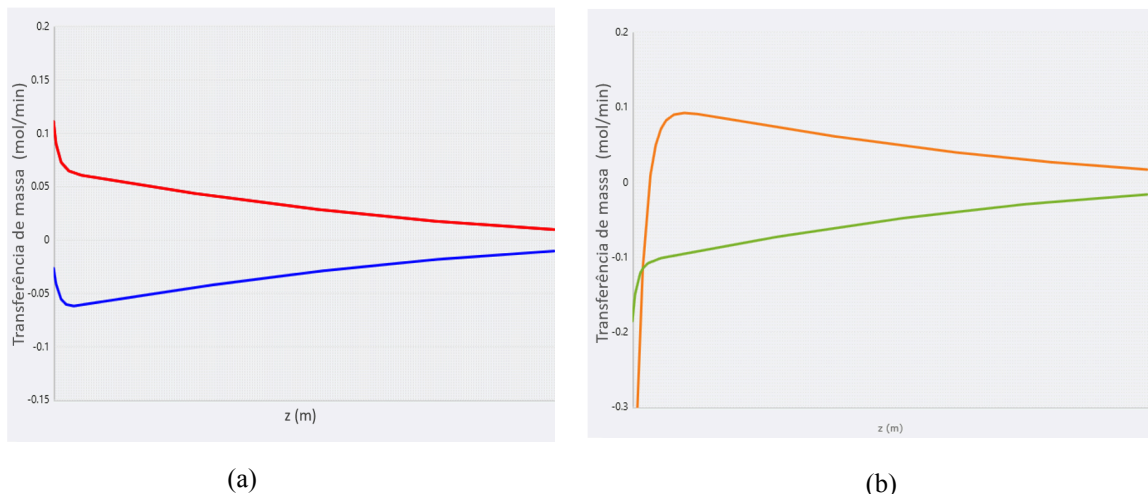
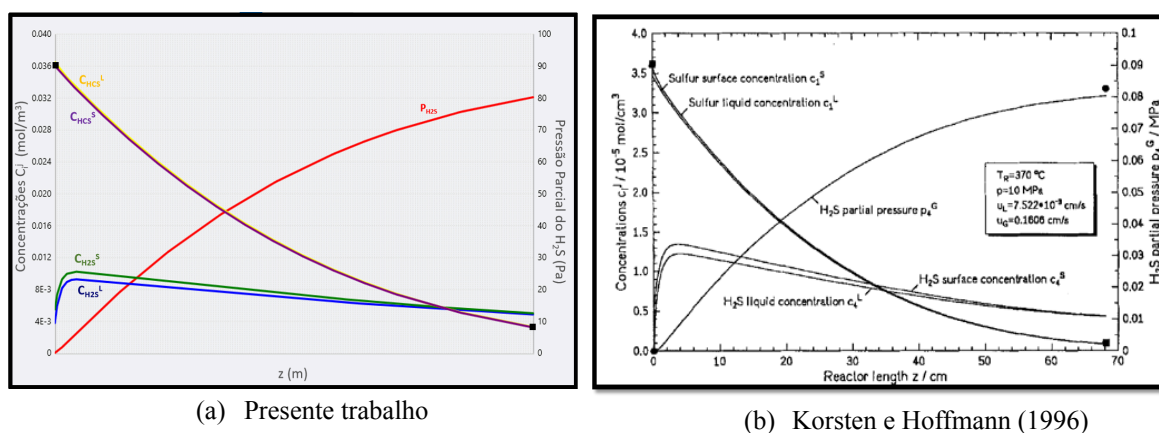


Figura 4. Comportamento da concentração do componente sulfurado ao longo do reator e Comportamento da concentração e da pressão parcial do H_2S ao longo do reator.



4. Conclusão

Neste trabalho foi desenvolvido um bloco reacional para a simulação do processo de hidrodesulfurização em reatores do tipo trickle-bed utilizando a plataforma Aveva Process Simulation. O modelo foi baseado em uma abordagem fenomenológica da literatura, incorporando balanços de massa, transferência de massa entre fases e cinética de reação do tipo Langmuir–Hinshelwood. O desenvolvimento do bloco foi realizado de forma incremental, passando por diferentes versões até a definição de sua arquitetura final, estruturada a partir da integração de submodelos responsáveis pela cinética de reação, propriedades físico-químicas e coeficientes de transferência de massa. Os resultados obtidos nas simulações apresentaram boa concordância com dados experimentais reportados na literatura, indicando que o modelo implementado é capaz de representar adequadamente o comportamento do processo de hidrodesulfurização. Dessa forma, este trabalho contribui para o desenvolvimento de ferramentas de modelagem e simulação aplicadas a processos de hidrotratamento, possibilitando a representação computacional do processo em ambiente de simulação comercial. Como perspectiva futura, o modelo desenvolvido poderá servir como base para aplicações associadas ao conceito de gêmeo digital, permitindo estudos voltados ao monitoramento, controle e otimização de processos em refinarias.

Agradecimentos: Os autores agradecem à UFCG pelo apoio institucional ao desenvolvimento deste trabalho.

Referências

- [1] A. S. Szklo, V. C. Uller, M. H. Bonfá. Fundamentos do Refino do Petróleo: Tecnologia e Economia. 3ª ed. Rio de Janeiro: Interciência, 2012.
- [2] B. Saha, S. Vedachalam, A. K. Dalai. Review on recent advances in adsorptive desulfurization. Fuel Processing Technology, doi:10.1016/j.fuproc, 2020.
- [3] A. Barros, B. Bishop, A. Tavernard, F. V. Lima, H. Bispo. Development of an Equation Oriented Model Applied to a Hydrodesulfurization (HDS) Process. AIChE, 2020.
- [4] F.J. Mendez, O.E. Franco-López, X. Bokhimi, D.A. Solís-Casados, L. Escobar-Alarcón, T.E. Klimova, Dibenzothiophene hydrodesulfurization with NiMo and CoMo catalysts supported on niobium-modified MCM-41, Appl. Catal. B Environ. (219), 479–491, 2017.
- [5] G. S. Pereira, H. Bispo, T. V. Costa, S. M. S. Neiro. From process simulation to digital twin: custom gasifier modelling, complex kinetics and optimisation in AVEVA Process Simulation, Digital Twin and Applications (2), <https://doi.org/10.1049/dgt2.70009>, 2025.
- [6] J. Ancheyta, A. Alvarez-Majmutov, C. Levya. Hydrotreating of oil fractions. Multiphase Catalytic Reactors, 295–329. doi:10.1002/9781119248491.ch13, 2016.
- [7] A. T. P. Neto, T. C. R. L. Fernandes, H. B. Silva Junior, A. C. B. de Araújo, J. J. N. Alves. Three-phase trickle-bed reactor model for industrial hydrotreating processes: CFD and experimental verification. Fuel Processing Technology, 208, 106496. doi:10.1016/j.fuproc.2020.106496, 2020.
- [8] H. Korsten, U. Hoffmann, Three phase reactor model for hydrotreating in pilot trickle bed reactors, AIChE J. (42), 1350–1360, 1996.
- [9] A. T. P. Neto. Modelagem e Simulação de Reatores de Hidrotratamento de Diesel. Tese de Doutorado. Campina Grande, Paraíba. 2013.
- [10] A. F. B. Soares. Desenvolvimento de um Módulo Reacional para o Processo de Hidrodessulfurização na Plataforma de Simulação Aveva Process Simulator. Tese de Doutorado. Campina Grande, Paraíba. 2022.
- [11] R. Chowdhury, E. Pedernera, R. Reimert. Trickle-bed reactor model for desulfurization and dearomatization of diesel. AIChE Journal (48), 126-135, 2002.