

ANÁLISE E OTIMIZAÇÃO DAS CONDIÇÕES OPERACIONAIS DE UM REATOR DE LEITO FIXO NA SÍNTESE DE FISCHER-TROPSCH

J. V. T. DELBIANCO¹, L. F. M. C. OLIVEIRA¹, L. V. BOAS¹, L. F. NOVAZZI^{1,*}

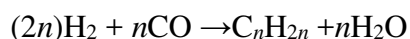
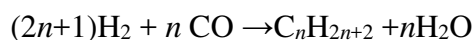
¹ Centro Universitário FEI, Departamento de Engenharia Química
*E-mail: lnovazzi@fei.edu.br

RESUMO: Pesquisas na área de rotas alternativas para a produção de combustíveis sintéticos vêm ganhando importância em virtude do esgotamento de recursos não renováveis. Nesse contexto, a síntese de Fischer-Tropsch é uma dessas possibilidades. O presente trabalho tem como objetivo o estudo das condições reacionais dessa síntese, em um reator de leito fixo. Para a realização dessa análise, foi feita a modelagem do sistema, através de balanços de massa e energia, juntamente com as leis cinéticas das reações e da perda de carga envolvida no escoamento. As equações diferenciais ordinárias geradas na modelagem do reator foram resolvidas e avaliadas no software MatLab. Após a resolução dessas equações, efetuou-se uma varredura no sistema, a fim de se observar o comportamento da seletividade e rendimento de gasolina. A partir dessas análises, foram avaliadas quais variáveis levariam a um melhor rendimento de gasolina, promovendo-se então mudanças nas condições de operação do reator e no seu sistema de resfriamento. Nas melhores condições, conseguiu-se um rendimento em gasolina de mais 8 g por 100 g de alimentação, o que é razoável quando se compara com dados de plantas piloto publicados em literatura.

PALAVRAS-CHAVE: Combustíveis sintéticos; síntese de Fischer-Tropsch; reator de leito fixo; modelagem.

1. INTRODUÇÃO

A síntese de Fischer-Tropsch envolve a produção de hidrocarbonetos de cadeia curta e longa, saturados e insaturados, a partir do gás de síntese, que é constituído por uma mistura de hidrogênio e monóxido de carbono. Essa síntese é representada de maneira genérica pelas reações a seguir, de natureza exotérmica, nas quais n é um número inteiro. Trata-se de uma forma de se obter gasolina sintética, num processo que tem sido usado desde os anos 1940.



Esse processo também é denominado como uma transformação gás / líquido ou GTL,

já que o gás de síntese é convertido em combustíveis líquidos, como indicado na Figura 1. Pode-se observar nesse diagrama a obtenção do gás de síntese propriamente dito, a partir da gaseificação de alguma fonte de carbono com oxigênio e vapor de água. O gás de síntese é então purificado e alimentado na síntese de Fischer-Tropsch, obtendo-se então hidrocarbonetos com diversos tamanhos de cadeia, que são posteriormente separados. As olefinas são isomerizadas e os hidrocarbonetos mais pesados separados, produzindo-se uma mistura de gasolina e diesel sintéticos.

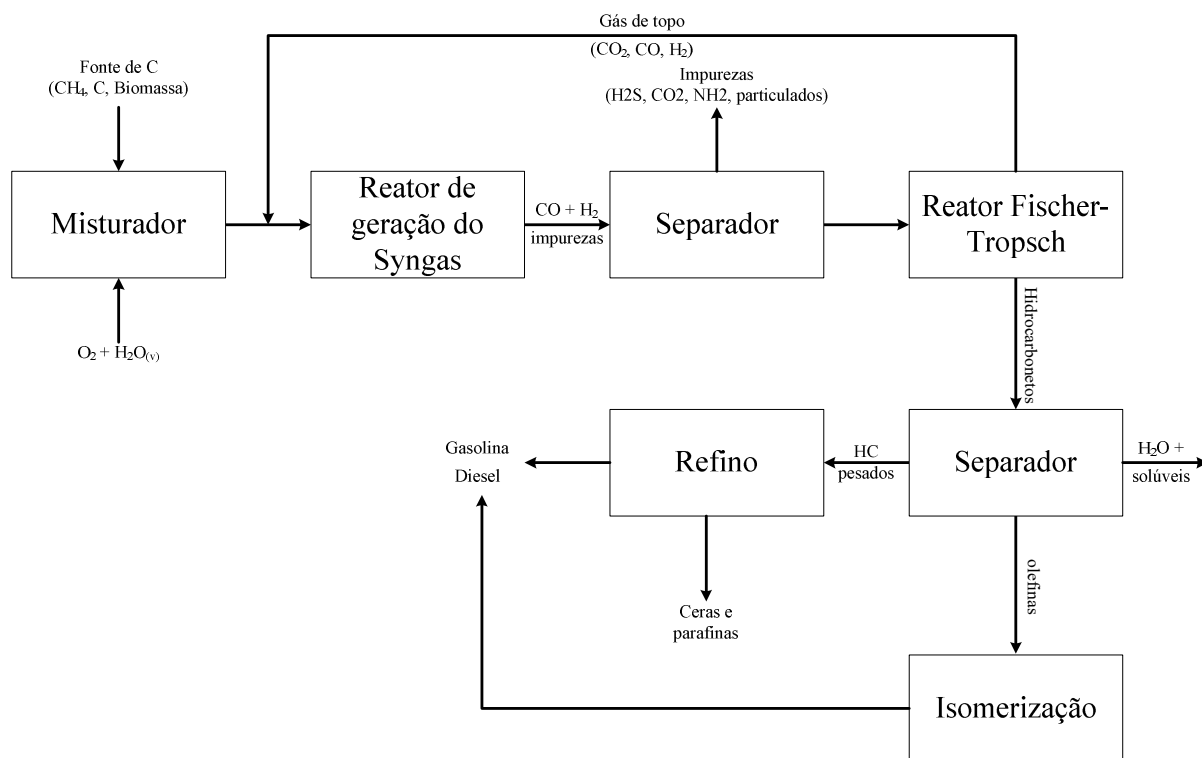


Figura 1 – Fluxograma de obtenção de combustível sintético.

Podem ser encontradas diversas aplicações industriais envolvendo a síntese de Fischer-Tropsch. A empresa SASOL (South African Coal, Oil, & Gas Corp) desenvolveu em 1995 um reator em leito fluidizado circulante (*Circulating Fluidized-Bed Reactor* ou CFB) e outro em fase de lama (*Sasol Slurryphase Reactor* ou SAS). O primeiro reator (CFB) usa um catalisador de ferro fundido no qual o gás de síntese é circulado através de um sistema complexo de tubos verticais com funis de carga. Como são circuladas toneladas de catalisador, a perda de carga se torna bastante relevante. O segundo reator (SAS) é um vaso contendo o leito fluidizado consistindo de catalisador de ferro fundido. Os produtos e reagentes não convertidos são retirados do reator através de um ciclone interno. As vantagens de se operar um SAS são sua simplicidade, fácil operação e manutenção.

O mecanismo de síntese por Fisher-Tropsch é ainda incerto, e, para tentar explicá-lo, foram desenvolvidas algumas teorias. Aquela mais aceita defende que, assim como nas reações com catalisador homogêneo (DRY; ANDERSON, 1984, apud ULLMANN'S, 2011), o monóxido de carbono é inserido na ligação entre o catalisador e hidrogênio, e, após a adição de outro hidrogênio a cadeia carbônica começa a se formar, dando origem a

hidrocarbonetos saturados ou insaturados (PICHLER; SCHULTZ, 1970, *apud* ULLMANN'S, 2011).

Apesar de o mecanismo de Fisher-Tropsch ainda não ser bem definido, o processo de crescimento da cadeia carbônica pode ser explicado fazendo-se uma analogia ao processo de polimerização. Ele acontece quando um átomo de carbono por vez é adicionado a cadeia em crescimento, e, em qualquer ponto dela, seu crescimento pode cessar com a adição de um átomo de hidrogênio ou pela abstração de um hidrogênio α desorvido da superfície do catalisador. Esta terminação no processo de crescimento gera uma variedade de comprimentos nas cadeias formadas (ULLMANN'S, 2011).

Para a obtenção de combustíveis a partir da síntese de Fischer-Tropsch, recomenda-se operar em duas faixas de temperatura, sendo uma alta (300°C a 350°C) e outra baixa (220°C até 250°C), o que impacta nos produtos obtidos. Aqueles produzidos à baixa temperatura são parafinas e óleo diesel e, para alta temperatura, são obtidas olefinas leves e gasolina (JAGER, 1994, *apud* ULLMANN, 2011).

Dada a relevância da síntese de Fischer-Tropsch, podem ser encontrados na literatura diversos trabalhos que tratam do tema. Um número significativo desses artigos procura atacar o problema do rendimento em gasolina e da formação de hidrocarbonetos em geral, o que é negativamente impactado pela chamada de reação de deslocamento ou de *shift*, na qual o monóxido de carbono reage com água, produzindo gás carbônico e hidrogênio. No estudo realizado por realizado por Forghani *et al.* (2009), por exemplo, foi utilizado um reator de membrana permeável a hidrogênio, atingindo-se uma boa seletividade para a gasolina e uma menor ocorrência da reação de *shift*.

Rahimpour e Elekaei (2009) estudaram um sistema reacional de leito fixo acoplado a um reator de leito fluidizado com uma membrana seletiva, com objetivo de se controlar a adição de hidrogênio, mantendo a relação H_2 / CO constante e próxima do ponto ótimo. Isso acabou proporcionando uma maximização do rendimento em gasolina.

Outra possibilidade da condução das reações de Fischer-Tropsch, que apresentam natureza fortemente exotérmica, é através do acoplamento com reações endotérmicas, num reator multifuncional. Rahimpour *et al.* (2010) estudaram tal acoplamento, num sistema regenerativo, melhorando o rendimento em gasolina.

Jiménez-García e Maya-Yescas (2014) realizaram um estudo sobre as diferenças de entalpia, entropia e energia livre de Gibbs durante a síntese de Fischer-Tropsch, para diferentes catalisadores. Foi observado que essa síntese, quando conduzida em catalisador à base de cobalto, provoca uma maior produção de parafinas e uma maior geração de calor. Já a síntese promovida com catalisador à base de ferro favorece uma maior seletividade de olefinas, e uma menor geração de calor que parafinas com o mesmo número de carbonos.

Moazami *et al.* (2015) simularam a síntese de Fischer-Tropsch em um reator de leito fixo, adotando um modelo matemático pseudo-homogêneo e considerando o meio reacional isotérmico. O estudo foi conduzido com o intuito de analisar os impactos causados por diferentes temperaturas e velocidades espaciais da corrente de entrada. Quanto a temperatura, seu aumento provoca uma melhor conversão de H_2 e CO , porém uma menor produção e

seletividade em gasolina. Esses autores observaram que um aumento da velocidade espacial da corrente de entrada promove uma menor conversão dos reagentes de partida, mas auxilia na taxa de produção gasolina.

Chabot *et al.* (2015) analisaram um reator duplo-tubo de leito fixo e verificaram como a dimensão dos tubos afeta o meio reacional. Com a simulação foi possível observar que o aumento do diâmetro dos tubos gera um impacto negativo na conversão do CO e na seletividade em gasolina. Shin *et al.* (2015) estudaram os efeitos promovidos por uma corrente de alimentação distribuída ao longo do meio reacional e um fluido refrigerante operando em contracorrente. Essa configuração promoveu uma redução no volume morto e uma melhor manutenção da temperatura no lado exotérmico do sistema.

Nesse contexto, o objetivo desse trabalho é estudar a síntese de Fischer-Tropsch em um reator de leito fixo. Para isso, o reator é modelado, considerando-se os balanços molares e de energia. Esse modelo é então simulado, a fim de se estudar o impacto das condições de operação sobre o rendimento em gasolina.

2. METODOLOGIA

2.1. Cinética das reações

As reações consideradas na síntese de Fischer-Tropsch nesse trabalho são dadas na Tabela 1. Nas reações de 1 a 6 são produzidos metano, etileno, etano, propano, *n*-butano e *i*-isobutano, enquanto que a gasolina sintética é simplificada por C₆H₁₂, na reação 7.

Tabela 1 – Reações na síntese de Fischer-Tropsch (Rahimpour e Bahmanpour, 2011)

Reação	Equação	<i>m</i>	<i>n</i>	k_i (mol/kg·s·bar ^{<i>m+n</i>})	E_i (kJ/mol)
1	CO + 3H ₂ → CH ₄ + H ₂ O	-1,089	1,566	1,426·10 ⁵	83,42
2	2CO + 4H ₂ → C ₂ H ₄ + 2H ₂ O	0,762	0,073	51,556	65,02
3	2CO + 5H ₂ → C ₂ H ₆ + 2H ₂ O	-0,565	1,315	24,717	49,78
4	3CO + 7H ₂ → C ₃ H ₈ + 3H ₂ O	0,405	0,663	4,632·10 ⁻¹	34,89
5	4CO + 9H ₂ → <i>n</i> -C ₄ H ₁₀ + 4H ₂ O	0,473	1,139	4,740·10 ⁻³	27,73
6	4CO + 9H ₂ → <i>i</i> -C ₄ H ₁₀ + 4H ₂ O	0,820	0,503	8,320·10 ⁻³	25,73
7	6CO + 12H ₂ → C ₆ H ₁₂ + 6H ₂ O	0,585	0,598	2,316·10 ⁻²	23,56
8	CO + H ₂ O ↔ CO ₂ + H ₂	-	-	-	-

A cinética das reações 1 a 7 foi levantada em literatura (Rahimpour e Bahmanpour, 2011), seguindo uma lei de potência e escrita em função das pressões parciais de monóxido de carbono, P_{CO} , e hidrogênio, em bar, conforme descrito na Equação 1. Nessa expressão, r_i representa a velocidade da *i*-ésima reação, em unidades de mol/kg·s, k_i a constante de velocidade e E_i a energia de ativação. Os expoentes *m* e *n* são apresentados na Tabela 1, de acordo com a reação em jogo.

$$r_i = 0,278 k_i \exp\left(\frac{-E_i}{RT}\right) P_{CO}^m P_{H_2}^n, \text{ com } i = 1, 2, \dots, 7 \quad (1)$$

Já a cinética da reação de shift, escrita na reação 8, foi considerada seguindo-se um modelo proposto por Wang *et al.* (2001) e apresentado na Equação 2, como função da constante de equilíbrio K_{WGS} e das pressões parciais de CO, H₂O e H₂, escritas em bar.

$$r_8 = 15,7 \exp\left(\frac{-45080}{RT}\right) \left(\frac{P_{CO} P_{H_2O}}{P_{H_2}^{0,5}} - \frac{P_{CO_2} P_{H_2}^{0,5}}{K_{WGS}} \right) \left[1 + 1,13 \cdot 10^{-3} \left(\frac{P_{CO} P_{H_2O}}{P_{H_2}^{0,5}} \right) \right]^{-1} \quad (2)$$

2.2. Modelagem matemática

Na modelagem utilizada nesse trabalho, foram consideradas as seguintes hipóteses:

- Gás ideal;
- Regime permanente;
- Meio reacional pseudo-homogêneo;
- Coeficiente global de transferência de calor U constante ao longo do reator.

A pressão parcial P_j de um dado componente j no meio reacional é definida na Equação 3, na qual F_j se refere à vazão molar do componente, F_T é a vazão molar total do meio e P a pressão total.

$$P_j = \frac{F_j}{F_T} P \quad (3)$$

A análise do reator foi feita com base na equação de balanço material para cada um dos componentes do meio, conforme expresso na Equação 4, na qual W representa a massa de catalisador e $r_{i,j}$ indica a velocidade do j -ésimo componente na i -ésima reação, num total de N reações.

$$\frac{dF_j}{dW} = \sum_{i=1}^N r_{i,j} \quad (4)$$

O balanço de energia para as reações de Fischer-Tropsch é escrito na Equação 5, como função da temperatura T do meio reacional, do coeficiente global de transferência de calor U , da temperatura do fluido refrigerante T_a , da relação entre área de troca de calor por volume a , da densidade aparente do leito ρ_{ap} , da entalpia de reação ΔH , do calor específico $C_{p,j}$ de cada componente e do número total de componentes M .

$$\frac{dT}{dW} = \frac{U a (T_a - T) / \rho_{ap} + \sum_{i=1}^N r_i \Delta H_i}{\sum_{j=1}^M F_j C_{p,j}} \quad (5)$$

A avaliação da temperatura do fluido refrigerante ao longo do leito fixo é feita através do balanço representado na Equação 6, na qual F_a é a vazão do fluido refrigerante e $C_{p,a}$ o calor específico desse fluido. Nessa formulação, considerou-se que o escoamento do meio reacional e do fluido de troca térmica acontece em paralelo no reator.

$$\frac{dT_a}{dW} = \frac{U a (T - T_a)}{\rho_{ap} F_a C_{p,a}} \quad (6)$$

A perda de carga no leito de partículas catalíticas foi estimada a partir da Equação de Ergun, escrita a seguir. Nessa expressão, β_0 é uma constante que depende de características do leito e de condições de alimentação e A_C é a área de seção transversal do leito.

$$\frac{dP}{dW} = - \frac{\beta_0}{A_c \rho_{ap}} \frac{P_o T}{P T_o} \frac{F_T}{F_{T_o}} \quad (7)$$

O sistema de equações diferenciais ordinárias descrito nas Equações 4 a 7 foi resolvido em Matlab, através da função *ode15s*, adequada para sistemas rígidos. As condições de alimentação utilizadas na solução desse sistema de equações são resumidas na Tabela 2 e na Tabela 3 se apresentam algumas características do leito de partículas e dos tubos simulados nesse trabalho. A relação molar entre hidrogênio e monóxido de carbono na alimentação do reator foi de 0,96 e utilizou-se um tempo espacial de 15,2 s. Fez-se também uma análise da temperatura de alimentação T_{ao} do fluido de troca térmica no reator, no intervalo de 475 a 485 K.

Tabela 2 – Condições de alimentação

parâmetro	valor	unidade
T_0	565	K
P_0	17	bar
F_{H20}/F_{CO0}	0,96	-
F_{T0}	0,335	mol/s
τ	15,2	s
T_{a0}	475 a 485	K
F_a	0,135	kg/s

Na Tabela 3 são definidos os diâmetros interno e externo dos tubos, D_i e D_o , o comprimento total L_0 do reator, o diâmetro d_p das partículas, a porosidade ϕ do leito e a densidade do catalisador, ρ_{cat} .

Tabela 3 – Características dos tubos do reator e do leito de partículas

parâmetro	valor	unidade
D_i	0,038	m
D_0	0,048	m
L_0	12	m
d_p	2,5	mm
ϕ	0,488	-
ρ_{cat}	2643	kg/m ³

2.3. Estimativa de propriedades físicas

Na Tabela 4 são resumidas as correlações utilizadas para a estimativa de propriedades físicas empregadas nesse trabalho, sendo que a indicação (p) se refere a um componente puro e a notação (m) está relacionada com a mistura. As variáveis C_p , μ , k e h_i representam o calor específico, viscosidade, condutividade térmica e o coeficiente convectivo do fluido no interior do leito, respectivamente.

Tabela 4 – Correlações para a estimativa de propriedades

variável	correlação	referência
$C_{p,j} C_{p,j} (p)$	$C_{p,j} = a + bT + cT^2 + dT^3 + eT^4$	Poling <i>et al.</i> (2001)
$C_p (m)$	ponderação pela composição	Perry (2008)
$\mu_j (p)$	função logarítmica	Poling <i>et al.</i> (2001)
$\mu (m)$	ponderação pela composição	Perry (2008)
$k_j (p)$	modelos de Eucken	Poling <i>et al.</i> (2001)
$k (m)$	equação de Wassiljewa	Poling <i>et al.</i> (2001)
h_i	$\frac{h_i D_i}{k} = 0,813 e^{-6d_p/D_i} \left(\frac{d_p G}{\mu} \right)^{0,9}$	Nietert (1983)

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

As equações de balanço material e de balanço de energia, descritas na seção anterior, foram resolvidas na região de operação definida na Tabela 2. Na Figura 2 são indicados os perfis de temperatura do meio reacional, em vermelho, e do fluido de troca de calor, em azul, considerando-se uma temperatura de alimentação desse fluido de 485 K. Esses perfis aparecem como função da massa de catalisador até uma dada posição, W , em relação à massa total de catalisador, Wt . Em outras palavras, a relação W/Wt indica uma posição adimensional no reator, sendo 0 a entrada e 1 a saída no equipamento. Por conta das reações envolvidas na síntese de Fischer-Tropsch serem muito exotérmicas, observa-se que há perda de controle de temperatura do meio reacional numa posição adimensional pouco maior do que 0,1. Nessa região, a temperatura do meio reacional ultrapassa 1600 K, inviabilizando a operação, com sérios riscos de segurança de processo associados.

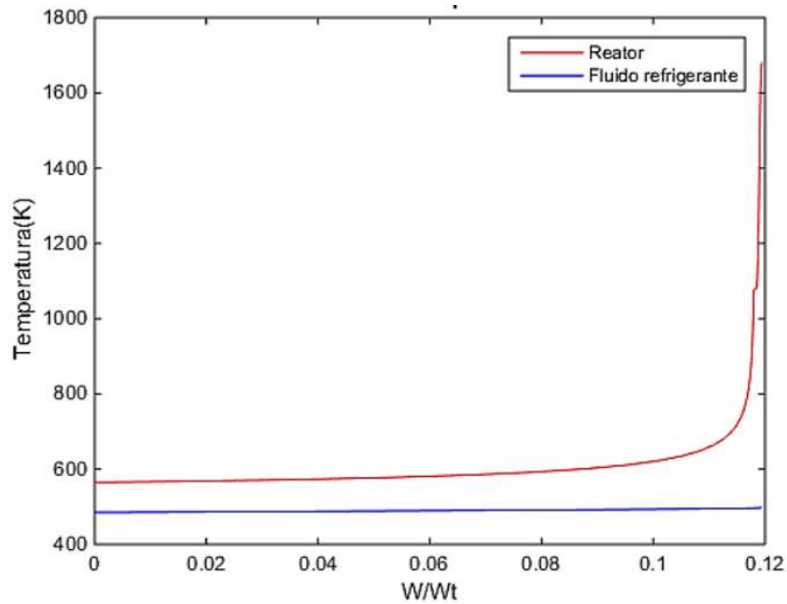


Figura 2 – Perfil de temperaturas no reator com T_{ao} de 485 K.

Tendo-se em conta o grande calor de reação envolvido na síntese de Fischer-Tropsch e para que não haja perda de controle de temperatura do meio reacional, é preciso alterar a condição do sistema de resfriamento do reator. Uma possibilidade é diminuir a temperatura de alimentação do fluido refrigerante, como indicado nos gráficos da Figura 3. No diagrama do lado esquerdo essa temperatura de alimentação T_{ao} foi de 475 K e no direito foi de 480 K. A perda de carga calculada no leito foi de 0,5 bar, o que não é tão significativo quando comparada com a pressão da corrente de alimentação, igual a 17 bar.

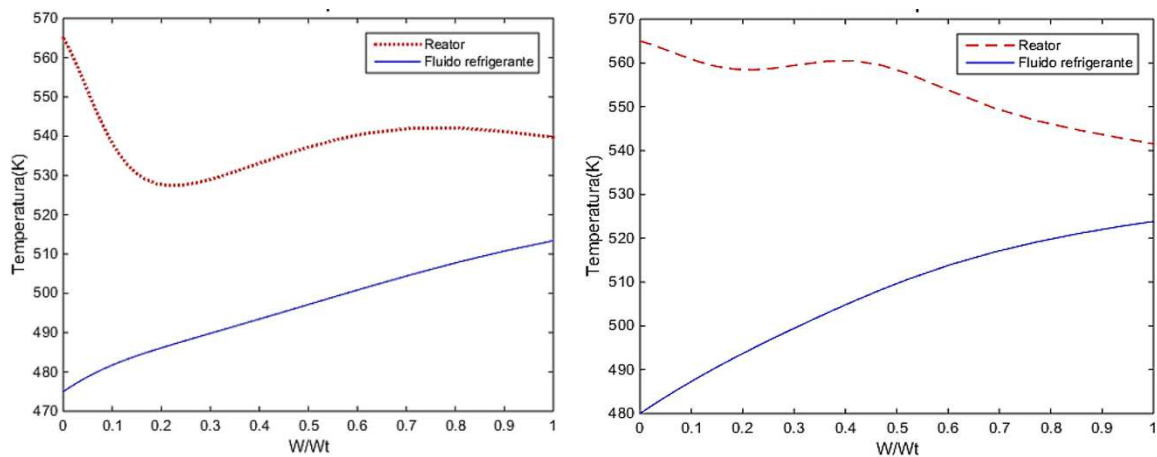


Figura 3 – Perfil de temperaturas no reator com T_{ao} de 475 e de 480 K.

Em ambas as situações, pode-se observar que não há mais perda de controle de temperatura do meio reacional. No trecho inicial do reator, correspondente a uma posição adimensional próxima a 0,1, nota-se que a troca de calor com o fluido de refrigerante é maior do que o calor liberado pelas reações, fazendo com que a temperatura do meio reacional caia, quer seja para T_{ao} de 475 ou 480 K. Depois dessa região, a troca de calor com o fluido

refrigerante diminui, em razão da queda na força motriz, resultando num aumento da temperatura do meio. Contudo, observa-se que o perfil de temperatura do meio reacional para uma alimentação de refrigerante a 480 K é mais uniforme do que aquele a 475 K.

A produção dos diferentes hidrocarbonetos a partir do gás de síntese é evidenciada na Figura 4, considerando-se uma temperatura de alimentação do fluido refrigerante de 480 K. Nessa figura, as taxas molares dos componentes em jogo no sistema reacional são plotadas em função da posição adimensional no reator. O CO e o H₂, representados pelas curvas azul e vermelha, respectivamente, são alimentados em proporção de 0,96. Vale notar a significativa formação de hidrocarbonetos de cadeia mais curta, como o metano, por exemplo, representado pela curva amarela no gráfico. Outro ponto interessante a ser analisado no gráfico é a importância da reação de *shift*, cuja consequência indesejada é a formação de CO₂ em grande quantidade, como se observa na curva roxa. Um dos focos de interesse na síntese de Fischer-Tropsch é a obtenção de gasolina sintética, representada na Figura 4 pela curva laranja e simbolizada, de modo simplificado, por C5+.

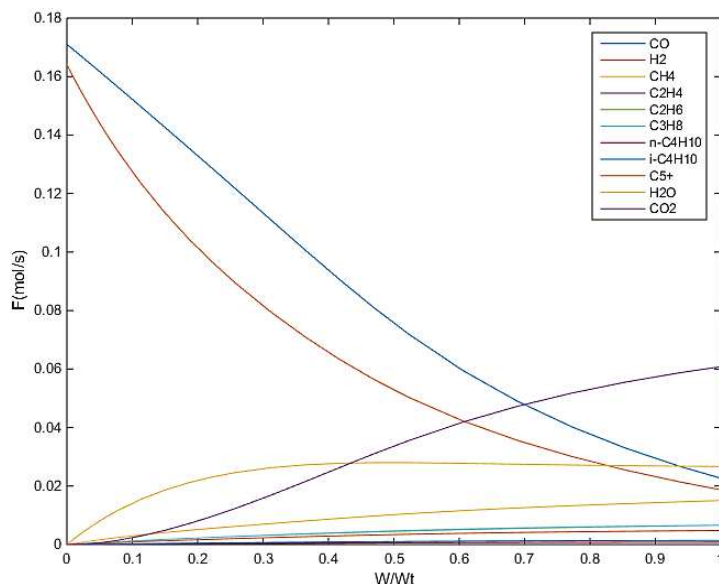


Figura 4 – Perfil de vazões molares dos componentes no reator com T_{ao} de 480 K.

O desempenho de um reator de Fischer-Tropsch pode ser avaliado pela produtividade em gasolina, caracterizada pela relação entre a quantidade desse combustível produzido, em gramas, por 100 gramas de gás de síntese que tenham sido alimentados ao processo. Essa quantidade também é chamada de rendimento em C5+, que aparece na Figura 5 como função da posição adimensional no reator. A curva de rendimento em preto está relacionada a uma temperatura de entrada de fluido refrigerante de 480 K e a curva vermelha e pontilhada a uma temperatura de entrada desse fluido de 475 K. Pode-se observar que na saída do equipamento os rendimentos em gasolina para as duas temperaturas de entrada do fluido refrigerante são pouco maiores do que 8 g / 100 g. Entretanto, nota-se também que esse rendimento é superior para a temperatura de 480 K em quase todo o comprimento do reator. Isso é um indicativo de que é interessante se operar o meio reacional com temperatura mais elevada e razoavelmente uniforme, conforme visto na Figura 3. O rendimento ilustrado nessa figura é semelhante a resultados obtidos de plantas piloto e publicados em literatura (Marvast *et al.*, 2005), nos

quais se chegou a pouco mais de 7 g / 100 g.

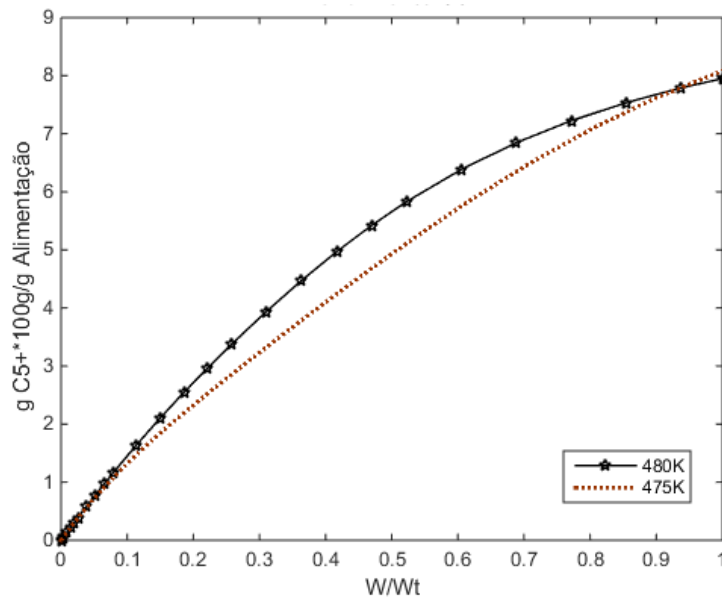


Figura 5 – Rendimento em gasolina (C5+).

Outra análise interessante a ser feita é a de produção de gasolina em relação aos outros hidrocarbonetos (HC's) de cadeia mais curta formados, como apresentado na Figura 6, também em função do comprimento adimensional do reator. Nota-se mais uma vez a vantagem de se conduzir a reação num patamar ligeiramente mais elevado de temperatura, que foi o caso com fluido de troca térmica sendo alimentado a 480 K. Essa relação entre a gasolina formada e os outros hidrocarbonetos aparece em base molar, sendo possível perceber a preponderância da formação dos hidrocarbonetos mais leves. A gasolina não chega nem a 10% do total, em base molar.

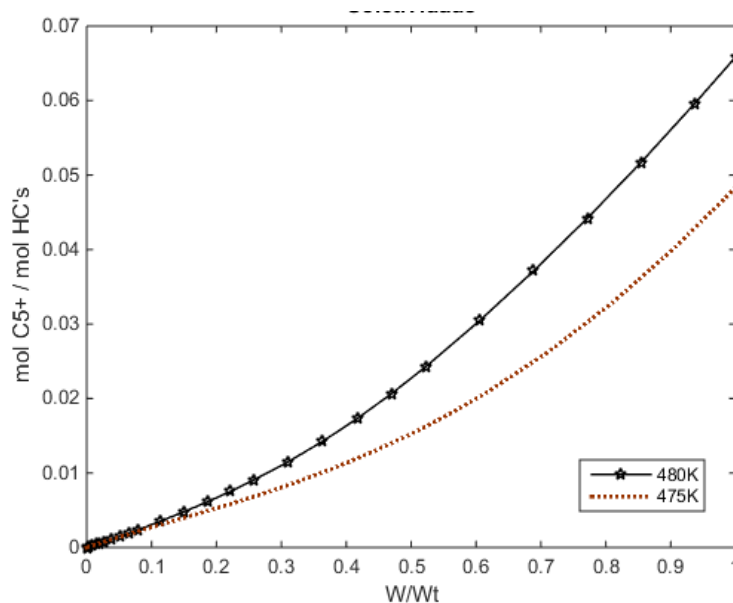


Figura 6 – Seletividade da gasolina em relação aos hidrocarbonetos formados.

Comentou-se anteriormente sobre a relevância da reação de *shift* no sistema e seu impacto negativo sobre a produção de gasolina e dos outros hidrocarbonetos na síntese de Fischer-Tropsch. Esse efeito é exposto na Figura 7, na qual a relação molar entre o CO₂ gerado e os outros hidrocarbonetos obtidos é colocada como função da posição adimensional no equipamento. Esses dados e a análise da Figura 6 mostram que um nível mais elevado de temperatura no lado exotérmico do sistema leva a uma maior produção de gasolina, mas com o efeito negativo de se gerar mais dióxido de carbono.

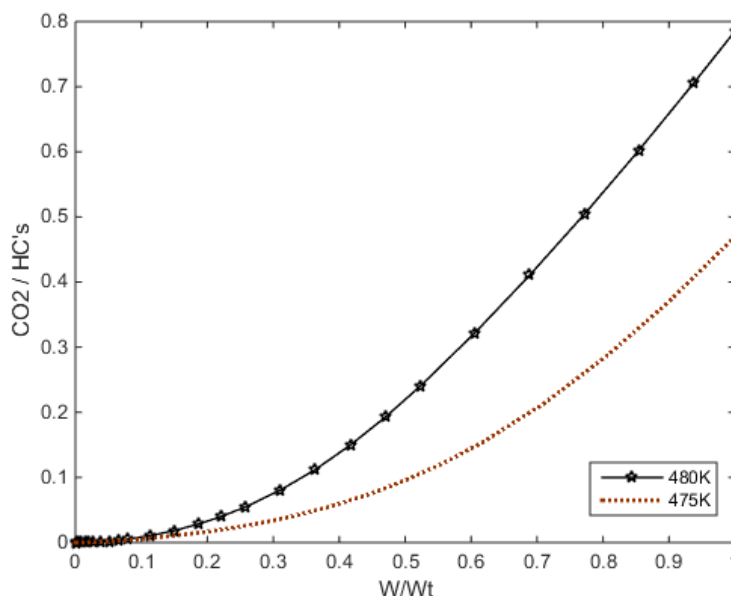


Figura 7 – Seletividade do gás carbônico em relação aos hidrocarbonetos formados.

4. CONCLUSÕES

Os resultados obtidos nesse trabalho mostraram a viabilidade da síntese de Fischer-Tropsch para a produção de gasolina sintética a partir de gás de síntese. Verificou-se que o nível de temperaturas do meio reacional impacta de modo significativo na produção de gasolina, devendo-se operar em temperaturas elevadas, mas sem perder o controle da reação (Figuras 2 e 3). Os efeitos adversos da reação de *shift*, gerando-se gás carbônico, foram evidenciados (Figuras 4 e 7) e são intrínsecos da síntese de Fischer-Tropsch. Nas condições de operação simuladas nesse trabalho, a perda de carga não ultrapassou 0,5 bar e conseguiu-se um rendimento em gasolina de mais de 8 g / 100 g (Figura 5).

5. AGRADECIMENTOS

Ao Centro Universitário FEI pelo suporte para o desenvolvimento do trabalho.

REFERÊNCIAS

CHABOT, G.; GUILLET, R.; COGNET, P.; GOURDON, C. A mathematical modeling of catalytic milli-fixed bed reactor for Fischer-Tropsch synthesis: Influence of tube diameter on Fischer-Tropsch selectivity and thermal behavior. **Chemical Engineering Science**, v.127, p.72-83, 2015.

- JIMENÉZ-GARCÍA, G.; MAYAS-YESCAS, G. Differences between Fischer-Tropsch synthesis of either gasoline or diesel based on charges of entropy and free energy. **Fuel**, v.149, p.184-190, 2015.
- MARVAST, M.A.; SOHRABI, M.; ZARRINPASHNE, S.; BAGHMISHEH, G. Fischer-Tropsch synthesis: modeling and performance study for Fe-HZSM5 bifunctional catalyst. **Chem. Eng. Technol.**, v.28, n.1, p.78-86, 2005.
- NIETERT, R.E. **Heat-transfer characteristics of flowing and stationary particle-bed-type fusion-reactor blankets**. Tese (Doutorado). Wisconsin: Universidade de Wisconsin, 1983.
- PERRY, R.H. **Perry's Chemical Engineers' Handbook**, 8 ed. Nova Iorque: McGraw-Hill, 2008.
- POLING, B.E.; PRAUSNITZ, J.M.; O'CONNELL, J.P. **The properties of gases and liquids**, 5 ed. Nova Iorque: McGraw-Hill, 2001.
- RAHIMPOUR, M.R.; BAHMANPOUR, A.M. Optimization of hydrogen production via coupling of the Fischer-Tropsch synthesis reaction and dehydrogenation of cyclohexane in GTL technology. **Applied Energy**, v.88, n.6, p.2027-2036, 2011
- RAHIMPOUR, M.R.; ELEKAEI, H. A comparative study of combination of Fischer-Tropsch synthesis reactors with hydrogen-permselective membrane in GTL technology. **Fuel Processing Technology**, v.90, p.747-761, 2009.
- RAHIMPOUR, M.R.; FORGHANI, A.A.; KHOSRAVANIPOUR, M.; SHARIATI, A. A comparison of co-current and counter-current modes of operation for a novel hydrogen-permselective membrane dual-type FTS reactor in GTL technology. **Fuel Processing Technology**, v.91, p.33-44, 2010.
- SHIN, D.Y.; HA, K.S.; PARK, M.J.; KWAK, G.; LEE, Y.J.; JUN, K.W. CFD modeling of a modular reactor for the Fischer-Tropsch synthesis: Effectiveness of a micro-scale cross-current cooling channel. **Fuel**, v.158, p.826-834, 2015.
- Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry**. 7 ed. Nova Iorque: Wiley-VCH, v.9, p.323-339, 2011.
- WANG, Y.N.; XU, Y.Y.; XIANG, H.W.; LI, Y.W.; ZHANG, B.J. Modeling of Catalyst Pellets for Fischer-Tropsch synthesis. **Ind. Eng. Chem. Res.**, v.40, n.20, p.4324-4335, 2001

ANALYSIS AND OPTIMIZATION OF OPERATIONAL CONDITIONS OF A PACKED BED REACTOR FOR FISCHER-TROPSCH SYNTHESIS

J. V. T. DELBIANCO¹, L. F. M. C. OLIVEIRA¹, L. V. BOAS¹, L. F. NOVAZZI^{1,*}

¹ FEI University, Department of Chemical Engineering

*E-mail: lnovazzi@fei.edu.br

ABSTRACT: *Due to the depleting of non-renewable fuel sources, a lot of academic and industrial effort has been made in the search for alternative routes. In this context, Fischer-Tropsch synthesis represents one possible solution. The goal of this work is the study of operational conditions involved in this synthesis, in a packed bed reactor. In this analysis, the system was modeled by taking into account material and energy balances, and kinetic laws and pressure drop in the reactor bed as well. The resulting ordinary differential equations were solved and evaluated in Matlab and operational conditions in the reactor were mapped. Gasoline yield and selectivity were analyzed and optimized through changes in the cooling system of the equipment. In the best operational conditions, gasoline yield was equal to 8 g / 100 g, which is really a good result when compared to pilot plant's data published in the literature.*

KEYWORDS: Synthetic fuels; Fischer-Tropsch synthesis; Packed bed reactor; Modelling.