

# بررسی عملکرد نانوکاتالیست آهن در تولید سوخت‌های مایع از گازهای سنتزی: مطالعات تجربی و مدل‌سازی CFD

محمد ایرانی<sup>۱</sup>، یحیی زمانی<sup>۲</sup>

۱- ایران، تهران، استادیار، پژوهشگاه صنعت نفت\* (مسئول مکاتبات)

۲- ایران، تهران، پژوهشگاه صنعت نفت، کد پستی ۱۴۸۵۷۳۳۱۱۱

نویسنده مسئول، ایمیل: uranium@ripi.ir

تاریخ دریافت: ۱۳۹۵/۱۲/۲۷ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۶/۰۳/۱۸

## چکیده:

در این تحقیق، برای بررسی تولید سوخت مایع از طریق فرآیند سنتز FTS، از دینامیک سیالات محاسباتی و مطالعات تجربی استفاده شده است. برای مطالعات تجربی از رآکتور لوله‌ای از جنس استیل با قطر ۱/۲ سانتی‌متر و طول ۸۰ سانتی‌متر استفاده گردید که در آن از ذرات سرامیکی به منظور رقیق کردن ابتدای بستر کاتالیست، جهت جلوگیری از فرار دما و ایجاد نقاط داغ استفاده شد. هیدرودینامیک، واکنش‌های شیمیایی، انتقال حرارت و جرم در داخل رآکتور به کمک CFD شبیه‌سازی گردید. یک هندسه با تقارن محوری با تعداد شبکه‌ی ۲۲۰۱۶ از سلول‌های مربعی ایجاد شد. رفتار غیر ایده‌آل ترمو دینامیکی مخلوط گازها، به‌وسیله‌ی معادله‌ی حالت Peng-Rabinson مدل‌سازی شد. مدل‌های سینتیکی برای سرعت واکنش‌های FTS و واکنش‌های جابجایی آب-گاز بر اساس مدل Langmuir-Hinshelwood برای هر کدام از اجزا انتخاب گردید. تطابق خوبی بین داده‌های تجربی و مدل، به‌دست آمد. به‌دلیل هزینه‌ی بالای آزمایشات، از مدل معتبر CFD، به‌عنوان آزمایش مجازی استفاده شد و جهت بررسی تأثیر دما، فشار، GHSV و نسبت H<sub>2</sub>/CO بر روی عملکرد رآکتور، مورد بررسی قرار گرفت.

کلمات کلیدی: سنتز فیشر تروپش، GTL، رآکتور بستر ثابت، کاتالیست‌های Fe و CFD.

## ۱- مقدمه

فرآیند تبدیل گاز به سوخت مایع، مربوط به فناوری‌های طراحی شده برای تبدیل گاز طبیعی و زغال سنگ به هیدروکربن‌های مایع مثل بنزین و سوخت دیزل است. فرآیند فیشر تروپش دارای ۴ مرحله‌ی اصلی و اساسی است که عبارتند از: (۱) خارج کردن آب و ناخالصی‌ها جهت آماده‌سازی گاز طبیعی (۲) رفرمینگ گاز طبیعی برای تولید مخلوط CO-H<sub>2</sub> که آن را sagnys می‌نامند. (۳) سنتز فیشر تروپش برای تولید هیدروکربن‌های سنگین‌تر از گازهای سنتز شده (۴) بهبود کیفیت محصول نهایی. کاهش در نرخ بهره‌برداری نفت خام از مخازن و کشف ذخایر جدید گاز در جهان، در سال‌های اخیر فرآیند FTS را جذاب‌تر ساخته است. همچنین برخی از مخازن گاز در مناطق دور افتاده قرار دارد و انتقال گاز طبیعی در این موارد، غیراقتصادی است. فرآیند FTS می‌تواند فرآیند مناسبی برای تبدیل گاز طبیعی به سوخت مایع باشد، که در این روش حمل و نقل منابع انرژی بسیار ساده‌تر و مقرون به‌صرفه‌تر است [۱ و ۲]. تحقیقات متعددی برای درک، مدل‌سازی و بهینه کردن این فرآیند انجام شده است، درحالی که برخی محققین، تحقیقاتی جهت یافتن تأثیر شرایط عملیاتی، روی عملکرد رآکتور مطالعاتی انجام داده‌اند [۳]. امروزه به لطف سرعت بالای محاسبات کامپیوتری، روش دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) به‌عنوان یک ابزار مفید برای درک پدیده‌های پیچیده‌ی فرآیندها و بهینه‌سازی تجهیزات در





مدل CFD برای مدل سازی FT در یک رآکتور کاتالیستی Fe-Cu-La/SiO<sub>2</sub> بستر ثابت مورد بررسی قرار گرفت. آزمایشات در یک رآکتور در ابعاد آزمایشگاهی انجام شد. برای جلوگیری از به وجود آمدن نقاط داغ، بستر کاتالیستی، در مهره های سرامیکی، رقیق شده است. معادلات کافی برای مدل کردن مخلوط گازی غیر ایده آل به کار رفته است.

## ۲- مواد و روش ها

رآکتور با کاتالیست Fe-SiO<sub>2</sub> (با نسبت های اتمی 100Fe/5.64Cu/2La/19Si) پر شد. یک جکت حرارتی، به منظور تأمین حرارت واکنش و کنترل دما، اطراف رآکتور قرار دارد. برای جلوگیری از به وجود آمدن نقاط داغ در ابتدای بستر کاتالیستی (محل ورود گاز به بستر) با استفاده از ذرات سرامیکی رقیق سازی صورت گرفته است. داده های تجربی تحت شرایط عملیاتی متفاوت به دست آمده اند و نمایه های دما در طول رآکتور و ترکیب درصد محصول به دست آمده تحلیل شده اند.

### ۲-۱- مدل سازی با استفاده از CFD

#### ۱-۲-۲- استراتژی حل و شرایط مرزی

یک مدل تقارن محوری با ابعاد ۸۰×۱/۲ سانتی متر، شامل فضایی جهت پیش گرم کردن سیال ورودی و فضای لازم برای واکنش (محیط متخلخل) با ۲۲۰۱۶ شبکه، مورد استفاده قرار گرفت (مطالعات جهت استقلال نتایج از تعداد شبکه انجام گرفته است). در ابتدای بستر کاتالیستی، جهت جلوگیری از بالا رفتن دما و فرار آن، از رقیق کردن به کمک دانه های سرامیکی استفاده گردید که بدین ترتیب رابطه ی واکنش و به طبع آن گرمای حاصل از واکنش، در منطقه ی رقیق شده، کاهش می یابد. در این فضا سرعت واقعی واکنش از رابطه ی زیر محاسبه می شود:

$$S_i = r_i \times F_{cat} \left[ = \right] \frac{kgmol}{kgcat.s} \times \frac{kg cat}{(kg cat + kg ceramic)} = \frac{kgmol}{(kg cat + kg ceramic).s} \quad (1)$$

شده مانند جرم، سرعت، انرژی و جزء جرمی اجزاء محاسبه می شود. در محاسبات حاضر، محاسبات عددی را تا جایی که مقادیر باقی مانده همگرا شوند، ادامه می دهیم. اختلاف مقادیر برای معادلات پیوستگی و مومنوم، کمتر از ۱۰-۴ و برای سایر مقادیر، کمتر از ۱۰-۷ باشد.

صنایع شیمیایی، استفاده شده است [۴-۶] و به خصوص در صنعت هوافضا موفق است [۷]. Troshko and Zdravistch. برای رآکتور حیابی FTS یک مدل CFD ارائه داده اند. هدف آنها پیش بینی کمی عملکرد رآکتور برای اهداف طراحی شده، بود. در مدل آنها واکنش های شیمیایی و اندازه حباب گاز و تأثیر کاتالیست های حاضر در فاز مایع مورد بررسی قرار گرفت. آنها نتایج به دست آمده از مدل سازی را با داده های تجربی تطبیق دادند و اطلاعات حاصل از مدل سازی یک رآکتور صنعتی را منتشر کردند. اگرچه تاثیر انتقال حرارت در اینجا در نظر گرفته نشد اما از آنالیزهای به دست آمده از FT به این نتیجه رسیدند که برای کنترل دمای رآکتور، زمانی که دبی گازهای سنتز کم است، پس از منطقه ی تزریق گاز، به یک دستگاه جهت دفع حرارت تولید شده نیاز است.

Arzamendi et al. به منظور توسعه ی مدل سه بعدی برای انتقال حرارت در رآکتور میکرو کانال FTS، از نرم افزار ANSYS CFX استفاده کردند [۸]. در تحقیق مذکور، تاثیر دبی خوراک، آب خنک کننده و فشار، بر روی عملکرد رآکتور مورد بحث واقع شد و نتیجه گرفتند که نیروی شناوری، تأثیر به سزایی بر عملکرد حرارتی میکرو رآکتور دارد. ذخایر گاز طبیعی در ایران در حدود ۹۲/۰۱۶ کیلومتر مکعب (1.045.7×10<sup>12</sup> cu ft) است که در حدود ۱۵/۸٪ ذخایر گاز جهان را تشکیل می دهد. که ۳۳٪ آن شامل گاز همراه و ۶۷٪ گاز مستقل است. ایران دومین کشور دارای ذخایر گازی جهان بعد از روسیه است. این مقدار زیاد گاز طبیعی، پتانسیل بالایی جهت تبدیل به سوخت های سنتزی را دارا است. پژوهشگاه صنعت نفت ایران تحقیقات گسترده ی تجربی و مدل سازی در این زمینه انجام داده است. در تحقیق حاضر، رآکتور بستر ثابت با پایه ی کاتالیست آهن- زئولیت، مورد مطالعه قرار گرفت. آب اشباع به عنوان زداینده ی حرارت و به منظور کنترل دمای رآکتور استفاده شد. بنابراین بیشترین افزایش دما در بستر کاتالیست 16 k است. در پژوهش حاضر،

شرایط مرزی جریان جرمی و فشار خارجی، به ترتیب به عنوان ورودی و خروجی های رآکتور استفاده شدند. دمای ثابت و شرط عدم لغزش برای دیواره ی رآکتور در نظر گرفته شد. روش حجم محدود برای حل معادلات به کار رفت. الگوریتم SIMPILE برای حل میدان فشار- سرعت استفاده شد. معیار همگرایی بر اساس مقادیر باقی مانده ی متغیرهای اندازه گیری

### ۲-۲-۲- معادلات بقاء

معادلات بقای جرم، مومنتوم و انرژی و ماده را می‌توان به صورت زیر نشان داد:

$$\text{Mass: } \nabla \cdot (\vec{v} \rho) = 0 \quad (2)$$

$$\text{Momentum: } \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla P + \nabla \cdot [\mu (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T)] + \rho g + S \quad (3)$$

$$\text{Energy: } \nabla \cdot (\vec{v} (\rho H + P)) + \nabla \cdot (\sum_{i=1}^n h_i j_i) = -\nabla \cdot (q) + S_R \quad (4)$$

$$\text{Species: } \nabla \cdot (\vec{v} C_i - D_i \nabla C_i) = R_i \quad (5)$$

$\rho$  چگالی مخلوط حاضر،  $\vec{v}$  بردار سرعت،  $H$  و  $h_i$  آنتالپی کلی و جزیی ذرات می‌باشند.  $P$  فشار استاتیک و  $C_i$  غلظت اجزاء است. فضای کاتالیست به‌عنوان یک محیط متخلخل در نظر گرفته شد و با افزودن پارامترهای مومنتوم، مدل شد.

$$S = - \left( \sum_{j=1}^2 D_{ij} \mu v_j + \sum_{j=1}^2 C_{ij} \frac{1}{2} \rho |v_j| v_j \right) \quad (6)$$

$$S_R = - \left( \sum_j \frac{h_j^0}{M_j} R_j \right) \quad (7)$$

**۲-۲-۳- خواص فیزیکی**  
رفتار ترمودینامیکی غیرایده‌آل سیستم به خاطر حضور محصولات سنگین و شرایط عملیاتی است [۹-۱۰]. بنابراین

$$\ln \bar{\varphi}_i = (Z-1) \frac{b_i}{b_m} - \ln(Z - \beta) - I \bar{q}_i, \quad q = \frac{a}{bRT}, \quad \bar{q}_i = q \left( 2 \times \frac{\partial a}{\partial x_i} - \frac{b_i [i]}{b} \right) \quad (8)$$

$$I = \frac{1}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2} \ln \left( \frac{Z + \varepsilon_1 \times \beta}{Z + \varepsilon_2 \times \beta} \right), \quad \beta = \frac{bP}{RT}, \quad f_i = \bar{\varphi}_i \times P \times y_i$$

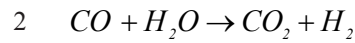
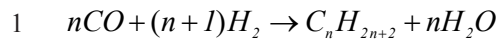
$f_i$  ضریب فوگاسیته‌ی ذرات و  $R$  ثابت جهانی گازها و  $MG$  وزن مولکولی مخلوط گاز و  $P$  فشار فرآیند (۱۷ bar) و  $z$  ضریب تراکم‌پذیری برای محاسبه‌ی چگالی.

$$\rho = \frac{PM}{ZRT} \quad (9)$$

مقدار پارامترهای معادله ۸ در منابع موجود است [۱۱]. ظرفیت گرمایی ویژه‌ی هر کدام از ذرات به صورت توابع چند جمله‌ای از دما، ارائه شده است. سایر خواص حرارتی مخلوط مانند ویسکوزیته‌ی مولکولی، هدایت حرارتی و ضریب نفوذ، به صورت متغیر با دما و کسر جرمی اجزاء، محاسبه شده است [۱۱].



لیست واکنش های FTS



معادلات اصلی سرعت واکنش برای محصولات iC مطابق معادلات زیر ارائه شده است [۱۲].

$$R_{C_i} = \frac{0.011 f_{H_2}^{0.7} f_{CO}^{-0.9}}{\left(2.2 - 0.18 \frac{f_{H_2}}{f_{CO}}\right)^{i-1}} \quad i = 4 - 9 \quad (10)$$

$$R_{C_i} = \frac{3 \times 10^{-5} f_{H_2}^{1.7} f_{CO}^{-1.1}}{\left(1.14 - 0.069 \frac{f_{H_2}}{f_{CO}}\right)^{i-1}} \quad i = 11 - 22 \quad (11)$$

$$R_{C_1} = .001518 * f_{H_2}^{0.241} / f_{CO}^{0.241} \quad (12)$$

$$R_{C_2} = .01819 * f_{H_2}^{0.045} / f_{CO}^{0.045} \quad (13)$$

$$R_{C_3} = .011 * f_{H_2}^{0.7} / f_{CO}^{0.9} \quad (14)$$

$$R_{C_{10}} = 3 \times 10^{-5} * f_{H_2}^{1.7} / f_{CO}^{1.1} \quad (15)$$

واکنش (۲) به عنوان جایجایی آب-گاز، شناخته شده و سرعت واکنش با معادله‌ی زیر توضیح داده شد [۱۲].

$$R_{WGS} = \frac{k_w \left( f_{CO} f_{H_2O} - \frac{f_{CO_2} f_{H_2}}{K_{WGS}} \right)}{\left( 1 + K_1 f_{CO} + K_2 f_{H_2O} \right)^2}$$

پارامترهای سینتیکی سرعت واکنش WGS، در منبع ۲۱ ارائه محاسبه می‌شود. شده است. Kwgs ثابت تعادلی واکنش است و از معادله‌ی زیر

$$\log K_{WGS} = \left( \frac{2073}{T} - 2.029 \right) \quad (16)$$



### ۳- بحث و نتیجه گیری

شرایط عملیاتی برای هر دو حالت تجربی و شبیه‌سازی یکسان است (H2/CO=1، GHSV=2000، P=17bar، T=573) مقادیر نشان داده شده در جدول حاکی از آن است که اختلاف مشاهده شده برای تمام مقادیر قابل مقایسه، کمتر از ۳٪ است. با در نظر گرفتن نتایج تجربی به دست آمده، مدل شبیه‌سازی شده در این تحقیق با موفقیت می‌تواند عملکرد فرآیند بستر ثابت FT را پیش‌بینی کند.

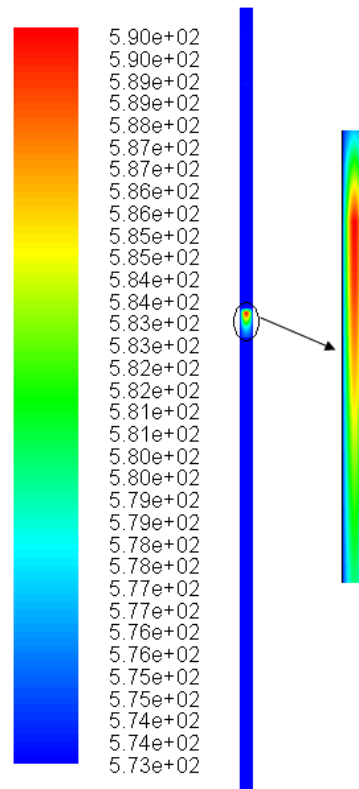
در مقایسه‌ی نتایج حاصل از شبیه‌سازی و نتایج تجربی، درصد مولی پیش‌بینی شده برای انتخاب‌پذیری C5+، درصد تبدیل CO در جریان خروجی از رآکتور و دما در سه نقطه در طول رآکتور: (۱) شروع بستر کاتالیستی، (۲) میانه‌ی بستر کاتالیستی، (۳) انتهای بستر کاتالیستی، مد نظر قرار گرفتند. داده‌های تجربی به دست آمده و نتایج حاصل از شبیه‌سازی، با یکدیگر مقایسه شد که نتایج آن در جدول ۱ ارائه شده است.

جدول ۱: مقایسه بین مقادیر اندازه‌گیری شده و پیش‌بینی شده برای مقیاس بستر فرآیند FTS

	ابتدا، میانه و انتهای بستر کاتالیست	Exp.	Pred.	% خطا
GHSV=200 hr <sup>-1</sup> T=573	(%) تبدیل CO	83	84.4	1.7
	انتخابی C5+	32.4	32.5	0.3
H2/CO=1 P=17 bar	دما در ابتدای بستر کاتالیست (K)	580	582	0.3
	دما در میانه بستر کاتالیست (K)	575	576	0.2
	دما در انتهای بستر کاتالیست (K)	564	568	0.7

می‌کنند و سرعت واکنش را کاهش می‌دهند که این موضوع باعث می‌شود گرمای واکنش کمتر شده و افزایش دمای کمتری رخ دهد.

کانتور دمای داخل رآکتور در شکل ۱ مشاهده می‌شود. این شکل نشان می‌دهد که دمای داخل رآکتور در دمای ورودی مورد نظر، به وسیله‌ی ذرات سرامیکی روی بستر کاتالیستی کنترل می‌شود. این ذرات به‌عنوان مواد بی‌اثر در واکنش عمل

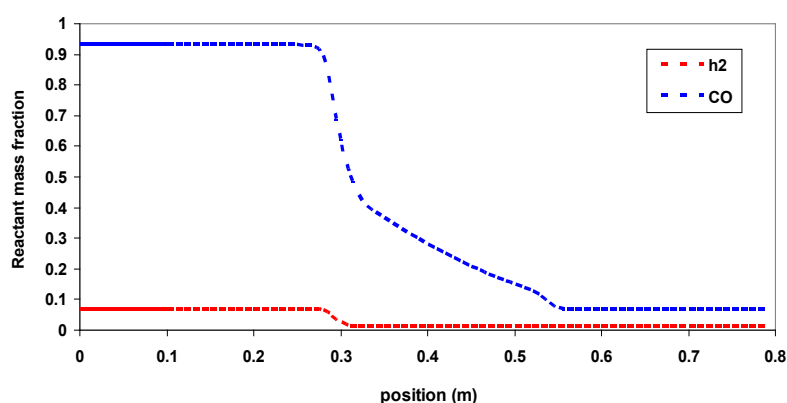


شکل ۱- کانتور دما در داخل رآکتور

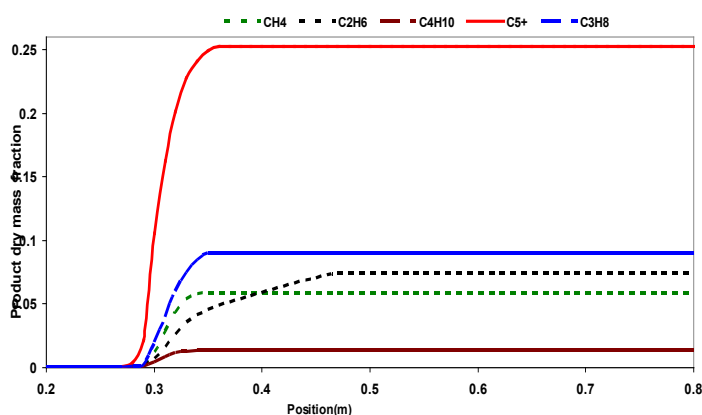


شده، در اثر مصرف واکنش دهنده‌ها، غلظت آن در طول رآکتور کاهش می‌یابد. بنابراین سرعت واکنش در طول بستر کاتالیستی کاهش یافته و در پی آن، شیب منحنی‌های غلظت در طول رآکتور کم می‌شود. تغییرات اصلی در غلظت واکنش دهنده‌ها و محصولات به جز اتان و CO، در ابتدای رآکتور رخ می‌دهد. اتان مانند مونومر عمل کرده و بلوک‌هایی را در حین فرآیند FT ایجاد می‌کند. جذب مجدد اتان در اثر کاهش تبدیل اتان و افزایش میزان هیدروکربن‌های سنگین رخ می‌دهد [۱۵-۱۳].

بیشترین غلظت واکنش دهنده‌ها در ابتدای بستر کاتالیستی است، بنابراین بیشترین سرعت واکنش در ابتدای بستر رخ می‌دهد. در ابتدای بستر کاتالیستی، ۱۷K افزایش دما اتفاق می‌افتد، که این پدیده به دلیل غلظت بالای واکنش دهنده‌ها در ابتدای بستر و همچنین سرعت بالای واکنش، گرمازا بودن واکنش در این منطقه است. در شکل ۲ نمایه‌ی جزء جرمی ذرات در طول رآکتور برای حالتی که دمای گاز ورودی ۵۷۳K است، نشان داده شده است. همانطور که در شکل نشان داده



(a) مواد اولیه

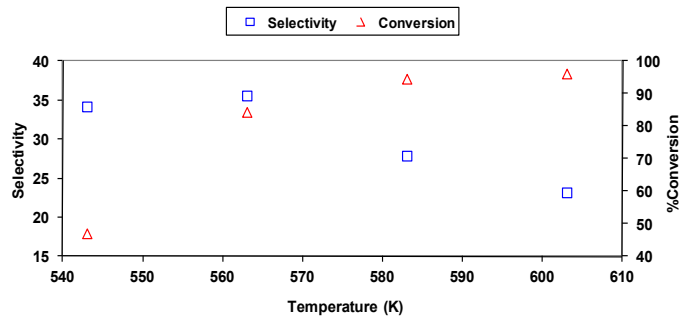


(b) محصولات

شکل ۲- نمایه‌ی غلظت محصولات و مواد اولیه در طول رآکتور

برای ارزیابی تاثیر دما و GHSV و فشار و نسبت دبی H<sub>2</sub>/CO بر روی عملکرد رآکتور، مدل رآکتور در ۴ سطح مختلف برای هر کدام از پارامترها اجرا شد. در تمام فرآیند بررسی، یک پارامتر تغییر داده شد و سایر پارامترها ثابت نگه‌داشته می‌شوند. انتخاب‌پذیری C<sub>5</sub>+ (gr C<sub>5</sub>+ / gr converted feed) برای دماهای مختلف در شکل ۳ نشان داده شده است.

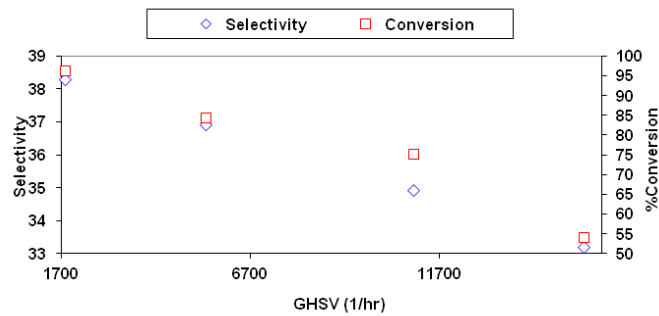
این تأثیر در معادله‌ی سرعت تولید اتان مشخص است. توان غلظت H<sub>2</sub> و CO در معادله‌ی ۱۲ بسیار کمتر از معادلات دیگر سرعت واکنش است. تفاوت بین نمایه‌ی غلظت CO با سایر مواد را می‌توان با این دلیل توجیه کرد. همان‌طور که قبلاً گفته شد، خطا بین داده‌های تجربی و نتایج حاصل از مدل‌سازی کمتر از ۳٪ است. بنابراین مدل معتبر بوده و برای مطالعات بعدی قابل استفاده است.



شکل ۳- تأثیر دما بر عملکرد رآکتور

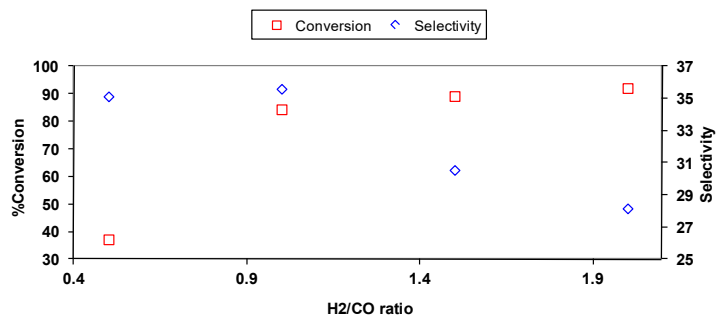
همان‌طور که در شکل نشان داده شده، افزایش دما از ۵۵۳ k - ۵۴۳ میزان انتخاب‌پذیری C5+ را افزایش داد. اگر چه افزایش بیش از ۳۶۳ k باعث کاهش میزان انتخاب‌پذیری C5+ را نشان داد. باید خاطر نشان کرد که افزایش دمای رآکتور دو اثر متقابل دارد: ابتدا سرعت واکنش را افزایش داده و در صورت

افزایش دما در بازه‌ی ۵۶۳-۵۵۳ حالت دوم واکنش جابجایی آب-گاز واکنش را به سمت واکنش دهنده‌ها پیش می‌برد و در نتیجه تولید C5+، در اثر کاهش غلظت H2 کاهش می‌یابد. شکل ۴ کاهش GHSV را نشان می‌دهد، که روند نزولی در میزان C5+ را به دلیل کاهش زمان اقامت نشان می‌دهد.



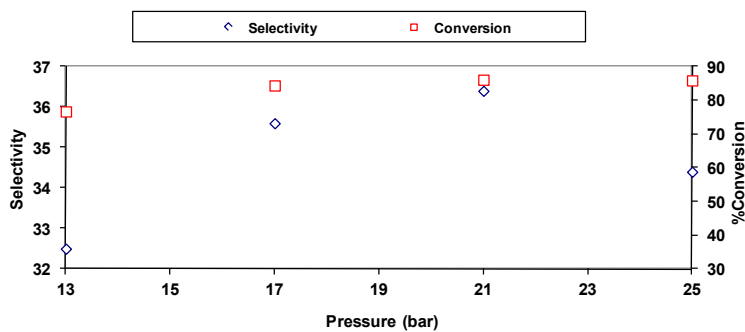
شکل ۴- تأثیر GHSV بر عملکرد رآکتور

تأثیر نسبت مولی H2/CO بر روی میزان C5+ در شکل ۵ نشان داده شده است. در اثر افزایش نسبت H2/CO، میزان H2 قابل استفاده برای انجام واکنش، افزایش می‌یابد و در نتیجه‌ی آن، رشد زنجیر پلیمریزاسیون به وسیله‌ی H2 متوقف می‌شود (در واکنش‌های اختتام شرکت می‌کند)، بنابراین تولید محصولات هیدروکربنی سنگین، کاهش می‌یابد.



شکل ۵- تأثیر نسبت خوراک بر عملکرد رآکتور

فشار نیز پارامتر دیگری است که بر روی C5+ تأثیرگذار است. در اثر افزایش فشار کلی، فشار جزئی واکنش دهنده‌ها افزایش می‌یابد که در نتیجه باعث افزایش تولید C5+ و آب به‌عنوان محصول در نظر گرفته می‌شود. همان‌طور که در شکل ۶ مشاهده می‌شود با افزایش فشار (۱۳-۲۱ bar) میزان C5+ نیز افزایش می‌یابد و با افزایش فشار تا ۲۵ bar میزان C5+ کاهش می‌یابد.



شکل ۶- تأثیر فشار بر عملکرد رآکتور

#### ۴- نتیجه‌گیری کلی:

مدل دو بعدی CFD، برای شبیه‌سازی جریان سیال، واکنش شیمیایی، انتقال حرارت و جرم در رآکتور بستر ثابت شبیه‌سازی شد. رفتار ترمودینامیکی غیر ایده‌آل با استفاده از معادله‌ی Peng-Robinson EOS مدل‌سازی شد. افزایش دما در حین فرآیند، به‌وسیله‌ی رقیق‌سازی بستر کاتالیست با ذرات سرامیکی، کاهش یافت. داده‌های به‌دست آمده از نتایج مدل‌سازی، در مقایسه با داده‌های تجربی حاصل از رآکتور FTS از جنبه‌های متفاوتی تطابق بالایی داشت و قابل قبول بود. مدل به‌دست آمده برای مطالعه‌ی تأثیر پارامترهایی مثل دما و فشار سیستم، GHSV و  $H_2/CO$  بر روی شرایط عملکرد رآکتور استفاده شد. نتایج حاصل نشان می‌دهد که پارامترهای فوق‌الذکر تأثیر متفاوتی بر روی انتخاب‌پذیری  $C_5+$  داشته است. تأثیر این پارامترها مطالعه و گزارش شد. مقادیر بهینه‌ی این پارامترها برای رسیدن به بیشترین بازده به‌دست آمد. برای هر کدام از پارامترها در شرایط عملکرد سیستم، مانند فشار، ترکیب درصد خوراک و دبی خوراک مقادیر بهینه‌ای به‌دست آمد.

در این تحقیق تأثیر هر یک از پارامترها بر شرایط عملکرد سیستم به‌طور جداگانه و با ثابت نگه‌داشتن سایر پارامترها مورد ارزیابی قرار گرفت. اگرچه تأثیرات متقابل این پارامترها بر روی یکدیگر ممکن است نتایج مختلفی در پی داشته باشد. بنابراین با توجه به تطابق داده‌های به‌دست آمده از مدل و داده‌های تجربی، مدل می‌تواند برای برآورد مقادیر بهینه‌ی پارامترهایی مثل دما و GHSV، بدون نیاز به داده‌های تجربی، برای مطالعات آینده مورد استفاده قرار گیرد.

#### منابع:

1. K.J. Woo, S.H. Kang, S.M. Kim, J.W. Bae, K.W. Jun, Performance of a slurry bubble column reactor for Fischer-Tropsch synthesis: Determination of optimum condition, Fuel Process. Technol. 91 (2010) 434-439.
2. G. Calleja, A.D. Lucas, R.V. Grieken, Co/ HZSM-5 catalyst for syngas conversion: influence of process variables, Fuel 74 (3) (1995) 445-451.
3. A. Nakhaei Pour, M.R. Housaindokht, S. F. Tayyari, J. Zarkesh, Effect of nano-particle size on product distribution and kinetic parameters of Fe/Cu/La catalyst in Fischer-Tropsch synthesis, J. Nat. Gas Chem. 19(2010)107-116.
4. K.V. Shah, R. Vuthaluru, H.B. Vuthaluru, CFD based investigations into optimization of coal pulveriser performance: Effect of classifier vane settings, Fuel Processing Technology 90 (2009) 1135-1141.
5. K. S. Bhambare, Z. Ma, P. Lu, CFD modeling of MPS coal mill with moisture evaporation, Fuel Process. Technol. 91 (2010) 566-571.
6. R. Vuthaluru, H.B. Vuthaluru, Modelling of a wall fired furnace for different operating conditions using FLUENT, Fuel Process. Technol. 87 (2006) 633-639.
7. A.A. Troshko, F. Zdravistch, CFD modeling







- of slurry bubble column reactors for Fischer-Tropsch synthesis, *Chemical Engineering Science* 64 (5) (2009) 892–903.
8. G. Arzamendi, P.M. Diéguez, M. Montes, J.A. Odriozola, E.F. Sousa-Aguiar, L.M. Gandía, Computational fluid dynamics study of heat transfer in a microchannel reactor for low-temperature Fischer-Tropsch synthesis, *Chemical Engineering Journal* 160 (3) (2010) 915–922.
  9. M. Irani, R.B. Bozorgmehry, M.R. Pishvaei, A. Tavasoli, Investigating the Effects of Mass Transfer and Mixture Non-Ideality on Multiphase Flow Hydrodynamics using CFD Methods, *Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering* 29 (1) (2010) 51-60.
  10. M. Irani, R.B. Bouzartjomehri, M.R. Pishvaei, impact of thermodynamic non-idealities and mass transfer on multi-phase hydrodynamics, *Scientia Iranica* 17 (1) (2010) 55-64.
  11. Poling B E, Prausnitz J M, O'Connell J P, the properties of gases & liquids, 5th ed., New York: McGraw-Hill, 2000.
  12. A. Nakhaei Pour, M.R. Housaindokht, S. F. Tayyari, J.Zarkesh, S.M. Kamali Shahri, Water-gas shift kinetics over a Fe/Cu/La/Si catalyst in Fischer-Tropsch synthesis, *chemical engineering research and design* 89 (2011) 262–26.
  13. B. Sarup and B. W. Wojciechowski, *Can. J. Chem. Eng.*, 66, 831 (1988).
  14. S. Novak, R. J. Madon, and H. Suhl, Secondary effects in the Fischer-Tropsch synthesis, *J. Catal.*, 77, 141 (1982).
  15. G.P. van der Laan, A. A. C. M. Beenackers, Kinetics and Selectivity of the Fischer-Tropsch Synthesis: A Literature Review, *Catalysis Reviews, CATAL. REV. SCI. ENG.*, 41(3&4), 255–318 (1999).

# Investigation of the Performance of Iron Nanocatalysts in Liquid Fuel Production from Synthetic Gases: Empirical Studies and CFD Modeling

Mohammad Irani<sup>1\*</sup>, Yahya Zamani<sup>1</sup>

1-Iran, Tehran, Research Institute of Petroleum Industry (RIPI) 1485733111

Corresponding Author, Email: uranium@ripi.ir

## Abstract

In this work a computational fluid dynamic (CFD) and experimental study of Fischer–Tropsch Synthesis (FTS) process in a fixed-bed reactor is presented. The reactor was a 1.2 cm diameter and 80 cm length steel tube in which ceramic particles were employed to dilute the catalyst bed and thus prevent the emergence of hot spots in it. An axi-symmetric CFD model with an optimized mesh of 22016 square cells was developed to model hydrodynamics, chemical reaction and heat and mass transfer in the reactor. Non-ideal thermodynamic behavior of gas mixture was modeled using Peng-Rabinson equation of state. Kinetic models for FTS and Water–Gas-Shift (WGS) reaction rates based on Langmuir–Hinshelwood type for each of species were employed. Good agreement was achieved between bench experimental data and the model. Because of the high price of reaction experiments and also safety the validated model used as numerical setup and the CFD simulations considered as numerical experiments. A sensitivity analysis was carried out in order to find the effect of temperature, pressure, and GHSV and H<sub>2</sub>/CO ratio on the reactor performance.

*Keywords: Fischer–Tropsch Synthesis, GTL, fixed bed reactor, Nano, Fe-Cu-La/SiO<sub>2</sub> catalyst, CFD.*

