



PROGRAMA EQ-ANP

**Processamento, Gestão e Meio Ambiente na Indústria
do Petróleo e Gás Natural**



**Estudo Tecnológico e Modelagem Reacional
para Processo Fischer-Tropsch com Gás
Natural**

Vitor Hugo Bezerra de Souza

Projeto de Final de Curso

Orientadores

Prof. Ofélia de Queiroz F. Araujo, Ph.D

Prof. José Luiz de Medeiros, D.Sc

Fernando Barbosa de Oliveira

Dezembro de 2008

ESTUDO TECNOLÓGICO E MODELAGEM REACIONAL PARA PROCESSO FISCHER-TROPSCH COM GÁS NATURAL

Vitor Hugo Bezerra de Souza

Projeto de Final de Curso submetido ao Corpo Docente do Programa Escola de Química/Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis – Processamento, Gestão e Meio Ambiente na Indústria de Petróleo e Gás Natural, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Engenheiro Químico com ênfase na área de Petróleo e Gás Natural – Engenharia de Petróleo.

Aprovado por:

Antônio Marcos Fonseca Bidart, D.Sc.

Joberto Ferreira Dias Júnior, Grad.

Sirlei Sebastião Alves de Sousa, Grad.

Orientado por:

Ofélia de Queiroz F. Araújo, Ph.D.

José Luiz de Medeiros, D.Sc.

Fernando Barbosa de Oliveira, Grad.

Rio de Janeiro, RJ - Brasil

Dezembro de 2008

Souza, Vitor Hugo Bezerra de.

Estudo Tecnológico e Modelagem Reacional para Processo Fischer-Tropsch com Gás Natural / Vitor Hugo Bezerra de Souza. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2008.

vii, 101 p.; il.

(Monografia) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2008.

Orientadores: Ofélia de Queiroz F. Araújo, José Luiz de Medeiros e Fernando Barbosa de Oliveira.

1. Fischer-Tropsch. 2. Modelagem. 3. Gás Natural. 4. Monografia. (Graduação – UFRJ/EQ). 5. Ofélia Araújo. 6. José Luiz de Medeiros. 7. Fernando Barbosa.

Dedicatória

Dedico este trabalho aos meus avôs Manoel e Maria de Lourdes, de quem guardo felizes recordações de minha infância.

Citação

“Tenho o desejo de realizar uma tarefa importante na vida. Mas meu primeiro dever está em realizar humildes coisas como se fossem grandes e nobres.”

Helen Keller

AGRADECIMENTOS

Agradeço,

Ao apoio financeiro da **Agência Nacional do Petróleo** – ANP – e da **Financiadora de Estudos e Projetos** – FINEP – por meio do Programa de Recursos Humanos da ANP para o Setor de Petróleo e Gás – PRH-ANP/MCT, em particular ao **PRH 13**, da Escola de Química - Processamento, Gestão e Meio Ambiente na Indústria do Petróleo e Gás Natural.

Aos meus pais, Caubi e Sandra, que juntos me educaram, orientaram, apoiaram, ensinaram valores e sempre se dedicaram para que eu tivesse todos os recursos e oportunidades para chegar até aqui. Muito obrigado.

A minha família, pelos ensinamentos que cada um me deu.

A professora de Química Mônica, que foi decisiva para minha opção pela Engenharia Química.

A Tathiana Cristina, que sem sua amizade, ajuda incondicional, paciência e caderno sempre atualizado, este momento demoraria mais.

Aos amigos de faculdade, Rafael Bertges, Fernanda, Fábio, Alexandre Jungman, Alexandre França, Lizandro, Igor, Márcio, Rafael (Chorão), Ângela, Fernando (Chopp), Fernando Peçanha, Marcela (Caninha), Maíra, Tatiana Felix, Mário, Fernando (Hawaii), Gregório, Giovane, Daniel e outros tantos com quem tive o prazer de conviver durante o curso.

Ao amigo e professor Eduardo Falabella, que acreditou no meu potencial quando me ofereceu uma oportunidade de estágio.

A equipe mais qualificada com que já trabalhei: Rayane, Thiago, Joberto, Carlota, Sirlei, Henrique, Isabela, Bidart, Antônio, Alex, Adriano, Fernando, que muito me ensinaram e que motivaram o tema deste trabalho.

Aos meus orientadores, Fernando, Ofélia e José Luiz, pelos ensinamentos, paciência, apoio e ajuda.

A todos os amigos e profissionais, que cada um a sua maneira, contribuíram para este momento.

Resumo do Projeto Final apresentado à Escola de Química como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Engenheiro Químico com ênfase na área de Petróleo e Gás Natural – Engenharia de Petróleo.

ESTUDO TECNOLÓGICO E MODELAGEM REACIONAL PARA PROCESSO FISCHER-TROPSCH COM GÁS NATURAL

Vitor Hugo Bezerra de Souza
Dezembro, 2008

Orientadores: Prof. Ofélia de Queiroz F. Araújo, Ph.D
Prof. José Luiz de Medeiros, D.Sc
Fernando Barbosa de Oliveira

No Brasil, as recentes e importantes descobertas de reservas de petróleo do pré-sal implicarão na intensificação do uso de Gás Natural no Brasil. A produção no pólo pré-sal em 2017 deverá ficar próxima de 1,2 milhão de barris/dia. Se esse volume estimado se confirmar, representará mais da metade da atual produção da Petrobras, de 1,885 milhão de barris/dia, segundo dados de agosto de 2008. Ao mesmo tempo, a produção de gás natural poderia alcançar 53 milhões de metros cúbicos/dia no pólo pré-sal no mesmo período, volume em patamar semelhante à produção atual de gás da Petrobras, de 52,7 milhões de metros cúbicos/dia. Frente ao cenário de expansão na oferta de GN, este trabalho aborda diversos tipos de utilização deste recurso

O objetivo deste trabalho é apresentar alternativas tecnológicas para utilização e transporte do Gás Natural que podem ser aplicadas no aproveitamento tanto das novas como das já existentes reservas de gás no Brasil, para a obtenção de Gás Natural Liquefeito (GNL), Metanol, Dimetil Éter (DME) e *Gas to Liquids* (GTL).

Adicionalmente a este levantamento na literatura, é apresentada a modelagem da síntese de Fischer-Trosch, etapa central do processo GTL, utilizando o modelo de distribuição de Anderson-Schulz-Flory. Nas simulações, apresenta-se a influência do fator probabilidade de crescimento da cadeia (α) nesta reação, e propõe-se fluxograma simplificado, simulado no ambiente de simulação comercial HYSYS.

Na conclusão, os resultados das simulações orientam no desenvolvimento de trabalhos futuros na síntese de Fischer-Tropsch e processo GTL.

Nome do Grau: Engenheiro Químico

Nome da Ênfase: Engenharia de Petróleo

Abstract of a Final Project presented to Escola de Química/UFRJ as partial fulfillment of the requirements for the degree of Chemical Engineer with emphasis on Petroleum and Natural Gas – Petroleum Engineer.

TECHNOLOGICAL STUDY AND REACTIONAL MODELING TO FISCHER-TROPSCH PROCESS WITH NATURAL GAS

Vitor Hugo Bezerra de Souza
December, 2008

Supervisors: Prof. Ofélia de Queiroz F. Araújo, Ph.D
Prof. José Luiz de Medeiros, D.Sc
Fernando Barbosa de Oliveira

In Brazil, the news and important discoveries of petroleum reservoirs in the pre-salt will imply in the enhancement of Natural Gas use in Brazil. In 2017, the production on the pre-salt pole should be near 1.2 millions of barrels per day. If this volume is confirmed, it represents more than a half of PETROBRAS' present production, which is 1.885 millions of barrels per day, according to data from august 2008. At the same time, the Natural Gas production should reach 53 millions of cubic meters per day in the pre-salt pole at the same period, which is in the same platform of PETROBRAS present production, of 52,7 millions of cubic meters per day. Regarding the scenario of increasing Natural Gas offer, this work approaches various ways of using this resource.

The objective of this work is to present technological alternatives to use and transport Natural Gas, which can be applied in the effective use of both new and old Natural Gas reservoirs in Brazil, to obtain Liquefied Natural Gas (LNG), Methanol, Dimetil Ether (DME) and Gas to Liquids (GTL).

In addition to this literature review, the Fischer-Tropsch synthesis, which is the GTL process central stage, was modeled using the Anderson-Schulz-Flory distribution model. In the simulations, the influence of chain growth probability factor (α) is showed for this reaction, and a simplified process flowchart is proposed, which was simulated using HYSYS commercial simulation environment.

In the conclusion, the simulation results guide the development of future works for Fischer-Tropsch synthesis and GTL process.

Title Name: Chemical Engineer

Emphasis Name: Petroleum Engineering

Sumário

1 - Introdução	5
1.1 - <i>Gás Natural</i>	6
1.1.1 - <i>O GN na Matriz Energética</i>	10
1.1.2 - <i>Reservas de GN</i>	11
1.1.3 - <i>Queima do Gás Natural</i>	12
1.1.4 - <i>Transporte</i>	15
1.2 - <i>Alternativas de uso do Gás Natural</i>	17
1.2.1 - <i>Gas to Liquids (GTL)</i>	17
1.2.2 - <i>Gás Natural Liquefeito (GNL)</i>	20
1.2.3 - <i>Metanol</i>	23
1.2.4 - <i>DME</i>	28
2 - Gas to Liquids (GTL)	33
2.1 - <i>Produtos</i>	35
2.2 - <i>Processos</i>	38
2.3 - <i>Geração de Gás de Síntese</i>	39
2.4 - <i>Síntese Fischer-Tropsch</i>	43
2.5 - <i>Beneficiamento dos Produtos</i>	46
3 - Modelagem do Processo GTL.....	49
3.1 - <i>Distribuição de Produtos da Síntese FT</i>	50
3.2 - <i>Premissas do Estudo</i>	51
3.3 - <i>Simulação de Síntese Fischer Tropsch</i>	53
4 - Resultados e Discussões	58
4.1 - <i>Melhor α para Maximizar Diesel</i>	58
4.2 - <i>A influência do Fator de Probabilidade de Crescimento de Cadeia (α)</i>	59
4.3 - <i>Resultados do Fluxograma</i>	64
5 - Conclusão	66
6 - Referências Bibliográficas.....	68
7 - Apêndice	73

Lista de Figuras

Figura 1.1 – Reservatório de Gás Associado (CONPET, 2004).....	6
Figura 1.2 - Reservatório de Gás Não Associado (CONPET, 2004).....	6
Figura 1.3 – Distribuição percentual das reservas provadas de Gás Natural, segundo Unidade da Federação, em 31/12/2007 (ANP, 2008a).....	12
Figura 1.4 – Destino da produção entre os anos de 2000 e 2006 (Branco, 2008).....	13
Figura 1.5 – Perfil de produção do GN no Brasil de 1970 - 2005 (Branco,2008).....	13
Figura 1.6 – Projetos do PLANGAS até 2010 (Branco,2008).....	15
Figura 1.7 – Unidade de liquefação (Souza, 2007).....	22
Figura 1.8 – Processo de regaseificação de GNL (Souza, 2007).....	23
Figura 2.1 – Principais fases do processos GTL (Elaboração Própria).....	38
Figura 2.2 – Algumas etapas envolvidas nas principais fases do processo GTL (Elaboração Própria).....	39
Figura 2.3 – Reatores para a síntese de Fischer-Tropsch: a. Reator de leito fixo multi-tubular; b. Reator de leito fluidizado circulante (CFB); c. Reator de leito fluidizado (FFB); d. Reator de leito de lama (Gomes et al, 2006).....	45
Figura 3.1 – Distribuição de ASF (Lann, 1999).....	49
Figura 3.2 – Distribuição de ASF (Elaboração Própria).....	50
Figura 3.3 – Relação molar Olefina/Parafina para a síntese de FT (Yakobson,2001).....	53
Figura 3.4 – Fluxograma da Síntese de FT para α 0,87 (Elaboração Própria).56	
Figura 3.5 – Reatores HPS na Pearl GTL (SHELL, 2008b).....	57
Figura 4.1 – Relação entre diesel e α (Elaboração Própria).....	58
Figura 4.2 – Relação 1 entre a carga de CO+H ₂ e α (Elaboração Própria).....	60
Figura 4.3 – Relação 2 entre a carga de CO+H ₂ e α (Elaboração Própria).....	61
Figura 4.4 – Relação 3 entre a carga de CO+H ₂ e α (Elaboração Própria).....	61
Figura 4.5 – Influência do α na relação molar H ₂ / CO (Elaboração Própria) ..	63
Figura 4.6 – Influência do α na distribuição de produtos (Elaboração Própria).....	64
Figura 4.7 Fluxograma da Síntese de FT para α 0,95 (Elaboração Própria)....	65

Lista de Tabelas

Tabela 1.1 – Composição Química do Gás Natural (CONPET, 2004).....	8
Tabela 2.1 – Principais Propriedades da Nafta Petroquímica GTL (Gomes et al, 2006).....	36
Tabela 2.2 – Principais Propriedades do Diesel GTL (Gomes et al,2006)	37
Tabela 2.3 – Propriedades de lubrificantes de diferentes grupos (Gomes et al, 2006)	38
Tabela 3.3.1 – Dados de Importação de Derivados do Petróleo (Elaboração Própria).....	51
Tabela 3.2 – Densidade adotada para os produtos (Elaboração Própria).....	53
Tabela 3.3 – Nomenclatura dos Equipamentos do Fluxograma de Síntese de FT	56
Tabela 4.1 – Dados das correntes para α de 0,87	65
Tabela 4.2 – Dados das correntes para α de 0,95	65

Lista de Símbolos e Abreviações

GN – Gás Natural

FT – Fischer-Tropsch

ASF – Anderson-Schulz-Flory

DME – Dimetil-Éter

Nomenclatura

α – Probabilidade de crescimento da cadeia

1 - Introdução

O crescimento da economia mundial e em especial do Brasil, traz consigo a necessidade de aumentar a oferta de insumos básicos para o desenvolvimento das empresas, que crescendo aumentam a oferta de empregos e fortalecem a economia. No Brasil um dos principais motores do desenvolvimento, senão o principal é a indústria de petróleo e gás, principal fonte de energia e matéria-prima para a indústria Petroquímica, que por sua vez tem um leque imenso de segmentos. Neste contexto, o Gás Natural (GN), um insumo que para alguns segmentos é usado como matéria-prima e para outros como combustível, vê sua importância aumentar nestes últimos anos.

No Brasil, as recentes e importantes descobertas de reservas de petróleo do pré-sal implicarão na intensificação do uso de gás natural no Brasil. A produção no pólo pré-sal em 2017 deverá ficar próxima de 1,2 milhão de barris/dia. Se esse volume estimado se confirmar, representará mais da metade da atual produção da Petrobras, de 1,885 milhão de barris/dia, segundo dados de agosto. Ao mesmo tempo, a produção de gás natural poderia alcançar 53 milhões de metros cúbicos/dia no pólo pré-sal no mesmo período, volume em patamar semelhante à produção atual de gás da Petrobras, de 52,7 milhões de metros cúbicos/dia (Cirilo Junior, 2008).

Frente ao cenário de expansão na oferta de GN, este trabalho aborda diversos tipos de utilização deste recurso, como a transformação em Gás Natural Liquefeito (GNL), Metanol, Dimetil-éter (DME) e na produção de hidrocarbonetos através de um processo conhecido mundialmente como Gás para Líquidos, ou *Gas to Liquids* (GTL). O processo GTL pode utilizar o GN como matéria-prima para gerar produtos de alto valor agregado, como olefinas leves, nafta petroquímica, diesel *premium* e lubrificantes, além de parafinas de com elevada qualidade, com baixíssimos teores de contaminantes, por exemplo o enxofre.

Na seqüência, apresenta-se a simulação da Síntese de Fischer-Tropsch (SFT), a etapa central do processo GTL, empregando-se modelo de distribuição de Anderson-Schulz-Flory (ASF) e a utilização de um simulador comercial de processos, o HYSYS.

1.1 - Gás Natural

O Gás Natural é uma mistura de hidrocarbonetos leves, que, à temperatura ambiente e pressão atmosférica, permanece no estado gasoso. Na natureza, ele é encontrado acumulado em rochas porosas no subsolo, freqüentemente acompanhado por petróleo, constituindo um reservatório. O Gás Natural é dividido em duas categorias: associado e não-associado. Gás associado é aquele que, no reservatório, está dissolvido no óleo ou sob a forma de capa de gás. Neste caso, a produção de gás é determinada basicamente pela produção de óleo. Gás não-associado é aquele que, no reservatório, está livre ou em presença de quantidades muito pequenas de óleo. Nesse caso só se justifica comercialmente produzir o gás. As Figuras 1.1 e 1.2 exemplificam estas situações (CONPET, 2004).

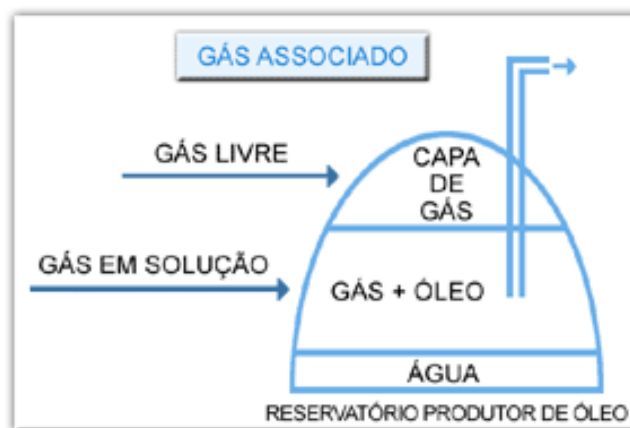


Figura 1.1 – Reservatório de Gás Associado (CONPET, 2004)



Figura 1.2 - Reservatório de Gás Não Associado (CONPET, 2004)

No caso das reservas de Gás Natural associado, seu aproveitamento está vinculado à quantidade de petróleo produzido, no entanto, a descoberta de Gás Natural, seja ele associado ou não, não significa que haverá um aumento, seja ele imediato ou proporcional, da oferta de gás para consumo longe dos campos de produção. O primeiro motivo para que isso ocorra é o custo de acesso à reserva que contém exclusivamente o Gás Natural. O segundo motivo é que o aproveitamento do Gás Natural associado está vinculado à produção de petróleo. Este é o caso da Bacia de Campos. O terceiro motivo é o alto custo associado à infra-estrutura para viabilizar o acesso ao Gás Natural, que acaba desestimulando o seu aproveitamento (ANP, 2001).

Uma característica importante da produção brasileira é a localização das reservas de petróleo e gás, com volumes consideráveis, no mar. A dificuldade e os custos de investimento e operação, característicos das operações *offshore*, limitaram a expansão do uso de Gás Natural no país (Branco, 2008). Apesar da dificuldade de expansão do uso do Gás Natural, foram a descoberta e o aumento contínuo da produção e do aproveitamento do gás associado ao petróleo na Bacia de Campos, que garantiram a introdução do Gás Natural na matriz energética do país entre 1980 e 2000 (ANP, 2001).

Nas unidades de produção, parte do gás é utilizada como gás *lift* para reduzir a densidade do petróleo facilitando sua extração (poços produtores de óleo). Parte é reinjetada com duas finalidades: recuperação secundária (que aumenta a pressão interna do reservatório - poços produtores de óleo) ou armazenamento em poços de gás não associado. O restante pode ser: (i) consumido internamente na geração de eletricidade e vapor; (ii) queimado em tochas (chaminés), caso não haja infra-estrutura suficiente que permita seu aproveitamento e; (iii) escoada para Unidades de Processamento de Gás Natural (UPGN) ou diretamente consumidas (CONPET, 2004).

A composição do Gás Natural pode variar bastante de campo para campo, o que depende de ele estar associado ou não ao óleo e também de ter sido ou não processado em unidades industriais. Ele é composto predominantemente de metano, etano, propano e, em menores proporções, de outros hidrocarbonetos de maior peso molecular. Normalmente, apresenta baixos teores de contaminantes, como nitrogênio, dióxido de carbono, água e compostos de enxofre.

A Tabela 1.1 apresenta composições típicas de gás na forma como é produzido (associado e não associado) e após processamento em Unidade de Processamento de Gás Natural (UPGN) (CONPET, 2004).

Tabela 1.1 – Composição Química do Gás Natural (CONPET, 2004)

ELEMENTOS	ASSOCIADO ¹	N. ASSOCIADO ²	PROCESSADO ³
METANO (C ₁)	78,74	87,12	88,56
ETANO (C ₂)	5,66	6,35	9,17
PROPANO (C ₃)	3,97	2,91	0,42
I-BUTANO (i-C ₄)	1,44	0,52	-
N-BUTANO (n-C ₄)	3,06	0,87	-
I-PENTANO (i-C ₅)	1,09	0,25	-
N-PENTANO (n-C ₅)	1,84	0,23	-
HEXANO (C ₆)	1,80	0,18	-
SUPERIORES (C ₇ -)	1,70	0,20	-
NITROGÊNIO (N ₂)	0,28	1,13	1,20
DIOXIDO DE CARBONO (CO ₂)	0,43	0,24	0,65
TOTAL	100	100	100
DENSIDADE	0,85	0,66	0,61
RIQUEZA (%MOL C ₃ -)	14,99	5,16	0,42
PODER CAL. INF. (KCAL/M ³)	11.666	9.249	8.621
PODER CAL. SUP. (KCAL/M ³)	12.816	10.223	9.549

¹ Gás do campo de Martin, Bacia de Campos, RJ.

² Gás do campo de Merluza, Bacia do Santos, SP.

³ Saída de UPGH-Candeias, BA.

Outra classificação que pode ser empregada é de acordo com a quantidade de hidrocarbonetos líquidos (C3 e superiores) que podem ser recuperados a partir do Gás Natural: gás úmido ou gás seco (Silva, 2000). Não existe uma definição única dos conceitos utilizados nesta classificação, existindo na prática diversas convenções para sua definição. Uma das convenções mais utilizadas, dada sua simplicidade, utiliza como base para a classificação a concentração volumétrica ou molar dos componentes do Gás Natural (Silva, 2000).

De acordo com este critério, um gás é considerado como gás úmido se apresenta uma concentração volumétrica ou molar dos componentes líquidos superior a 7%, com respeito à composição inicial. Se a concentração dos componentes líquidos for inferior a 7%, o Gás Natural se denomina gás seco (Silva, 2000).

As especificações do gás para consumo no Brasil são ditadas pelo Regulamento Técnico ANP N° 3/2002, anexo à Portaria N° 104, de 8 de julho de 2002, emitida pela Agência Nacional do Petróleo (ANP). O Gás Natural de origem nacional ou importado, comercializado no Brasil, é classificado por região geográfica.

A parcela do Gás Natural produzida e conduzida até as Unidades de Processamento de Gás Natural (UPGN) é de gás que foi tratado nas próprias unidades de produção. Ao chegar às UPGN's, ocorre a separação das frações mais leves do Gás Natural e obtêm-se o Gás Natural seco (metano e etano), o Gás Liquefeito de Petróleo -

GLP (propano e butano) e a gasolina natural (pentano e superiores). A produção do Gás Natural pode ocorrer em regiões distantes dos centros de consumo e, muitas vezes, de difícil acesso, como, por exemplo, a floresta amazônica e a plataforma continental. Por esse motivo, tanto a produção como o transporte são normalmente atividades críticas do sistema.

Das UPGN's, o gás seco pode ser transportado até os pontos de entrega para as companhias distribuidoras ou, eventualmente, diretamente a um grande consumidor. O transporte do Gás Natural pode ser feito: (i) por meio de dutos, forma convencional; (ii) em cilindros de alta pressão (como GNC - Gás Natural Comprimido) e; (iii) no estado líquido (como GNL - Gás Natural liquefeito), podendo ser transportado por meio de navios, barcaças e caminhões criogênicos, a -160°C , sendo seu volume neste caso, reduzido em cerca de 600 vezes, facilitando assim o armazenamento. Nesse caso, para ser utilizado, o gás deve ser regaseificado em equipamentos apropriados como será explicado mais adiante (Souza, 2004).

A partir do transporte do Gás Natural, seja por quaisquer meios existentes, este energético pode ser então vendido para os consumidores finais através dos ramais de distribuição. A distribuição é a etapa final do sistema, quando o gás chega ao consumidor que pode ser residencial, comercial, industrial e automotivo. Nos países de clima frio, seu uso residencial e comercial é predominante para aquecimento ambiental. No Brasil, esse uso é quase exclusivo em cocção de alimentos e aquecimento de água (Silva, 2000). No setor residencial, a vantagem é que substitui o consumo de energia elétrica para aquecimento de água e ambientes, substitui o GLP e oferece mais conforto e segurança no ambiente doméstico (Silva, 2000).

Na indústria, o Gás Natural é utilizado como combustível para fornecimento de calor, geração de eletricidade e de força motriz. No setor energético, por exemplo, permite a geração através de turbinas a gás, além de sistemas de cogeração, que são formas eficazes de utilização. Nos setores químicos e petroquímicos é usado como matéria-prima. Exemplos disto são as correntes de etano e propano que podem ser usadas na produção de polímeros, e ainda o Gás Natural pode ser empregado na produção de H_2 , ou gás de síntese (mistura de $\text{CO} + \text{H}_2$) para Amônia e Metanol.

Encontra-se uso também no setor de fertilizante e como redutor siderúrgico na fabricação de aço. Na área de transportes, é utilizado em ônibus e automóveis, substituindo o óleo diesel, a gasolina e o álcool (Souza, 2004).

1.1.1 - O GN na Matriz Energética

O modelo adotado para o setor elétrico no Brasil apresenta características muito peculiares que o distingue daqueles vigentes na maioria dos países (ANP, 2008b). Em primeiro lugar, o sistema elétrico brasileiro funciona de forma integrada, permitindo a transferência de energia entre as diferentes regiões do território. Além disso, a energia gerada é predominantemente hídrica, o que, por um lado, apresenta vantagens advindas dos ganhos com a modicidade tarifária, mas, por outro, introduz grande complexidade ao sistema energético do país, em virtude da imprevisibilidade do regime pluviométrico. Surge daí, a necessidade de maior coordenação no sistema para fazer face a esta complexidade (ANP, 2008b).

Em complementação ao sistema hidrológico, foram instaladas as usinas térmicas para serem despachadas sempre que o nível dos reservatórios se apresentarem abaixo do limite de segurança estabelecido.

Em virtude de muitas destas térmicas serem movidas a Gás Natural, a interface desta indústria com a de energia elétrica torna-se um tema que também necessita de planejamento e coordenação.

Diante disto, a insuficiência da oferta de gás coloca em pauta a busca pelas melhores soluções de política energética para o atendimento adequado à totalidade da demanda nacional, tanto para as usinas térmicas com vistas à geração elétrica, quanto para os segmentos industrial, residencial, automotivo e outros.

É neste âmbito, portanto, que a diversificação das fontes de suprimento torna-se de suma relevância para mitigar os riscos de falta de energia.

Nesse sentido, o GNL vem desempenhando uma importante alternativa ao transporte por dutos, principalmente nos casos em que: (i) existe incerteza quanto à entrega de gás no volume negociado com o país exportador; (ii) a malha de transporte ainda é incipiente ou inexistente; (iii) os dutos já estão operando no máximo de sua capacidade; e (iv) a demanda total de Gás Natural de um país é atendida por mais de uma fonte exportadora, por vezes com a utilização de diferentes modalidades de transporte.

1.1.2 - Reservas de GN

Analisando o período compreendido entre os anos de 1964 e 2007, as reservas provadas de Gás Natural cresceram a uma taxa média de 7,7% ao ano. Este crescimento está relacionado principalmente às descobertas decorrentes do esforço contínuo do país para diminuir o grau de dependência do petróleo. As principais descobertas ocorreram na Bacia de Campos (bacia sedimentar onde se encontra a maior concentração de campos gigantes do país, tais como Albacora, Marlim e Roncador), bem como na Bacia do Solimões (bacia sedimentar onde se encontram o Pólo de Urucu - local onde boa parte do gás é reinjetado, e a jazida de Juruá, ainda sem aplicação comercial) (ANP, 2008a).

A evolução das reservas de Gás Natural no país apresenta um comportamento muito próximo ao das reservas de petróleo, devido principalmente à ocorrência de Gás Natural sob a forma associada. Há, no entanto, a expectativa de que novas reservas de Gás Natural sejam descobertas, eminentemente sob a forma não-associada, tal como é sinalizado pelas descobertas recentes na Bacia de Santos.

Em 2007, as reservas provadas de Gás Natural ficaram em torno de 364,9 bilhões m³, um crescimento de 4,9% em relação a 2006. As reservas nacionais, apesar de estarem em sua maior parte na forma associada, encontram-se pulverizadas por várias regiões do território brasileiro. De todo o Gás Natural descoberto no país, 18,7% estão em terra – principalmente no campo de Urucu (AM) e em campos produtores no estado da Bahia –, enquanto que os 81,3% restantes estão localizados em mar, principalmente na Bacia de Campos, a qual detém 42,2% de todas as reservas deste energético no Brasil, conforme Figura 1.3 (ANP, 2008a).

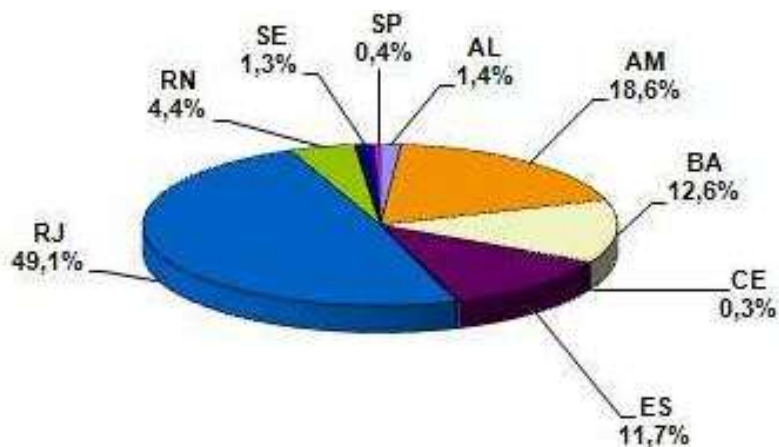


Figura 1.3 – Distribuição percentual das reservas provadas de Gás Natural, segundo Unidade da Federação, em 31/12/2007 (ANP, 2008a)

1.1.3 - Queima do Gás Natural

Na indústria de petróleo, grandes quantidades de Gás Natural são co-produzidas. Nesta o Gás Natural pode ser usado para produção de hidrogênio, mas grande parte é ainda queimada no *flare* ou reinjetada nos reservatórios. Além disto, existem reservas de Gás Natural não exploradas por causa da dificuldade de localização e/ou volumes incompatíveis com o transporte.

Nem toda a quantidade de gás produzido pode ser convertida na quantidade de gás ofertado, porque parte do gás é destinada ao consumo próprio. Pode-se observar na Figura 1.4 que o percentual de consumo próprio de Gás Natural permanece praticamente constante, em 13%, até o ano de 2004, mas tem um pequeno aumento e atinge 16% no ano de 2006. A crescente necessidade da utilização do Gás Natural como fonte de energia na atividade de produção não deve permitir que o percentual de consumo próprio de Gás Natural diminua frente à produção (Branco, 2008).

Além do consumo próprio, parte da produção é reinjetada no reservatório de origem, parte é perdida no processo de extração e parte é queimada ainda na área de produção, por não poder ser aproveitada economicamente. O restante do gás representa a disponibilidade interna, portanto representa a oferta líquida de Gás Natural (ANP, 2001). A Figura 1.4 mostra o percentual para cada destino da produção entre os anos de 2000 e 2006.

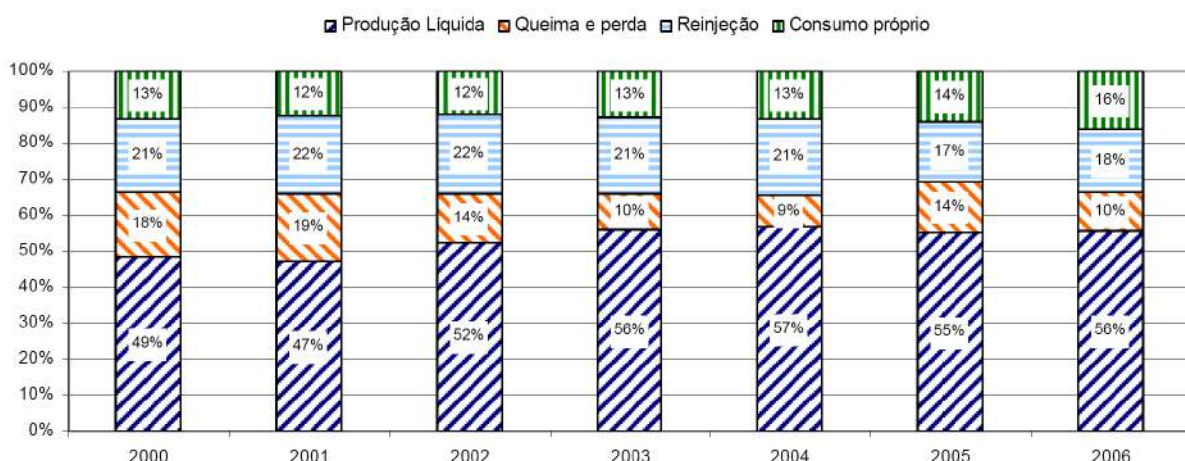


Figura 1.4 – Destino da produção entre os anos de 2000 e 2006 (Branco, 2008)

A quantidade de Gás Natural queimado durante o processo de produção nas diversas plataformas ao longo do país sofreu uma grande redução desde a década de 70, quando mais de 80% da produção brasileira não era aproveitada (Figura 1.5). Aumento de produção e de demanda, novas tecnologias, pressão ambiental e legislação apropriada, são fatores que contribuiriam para esta redução.

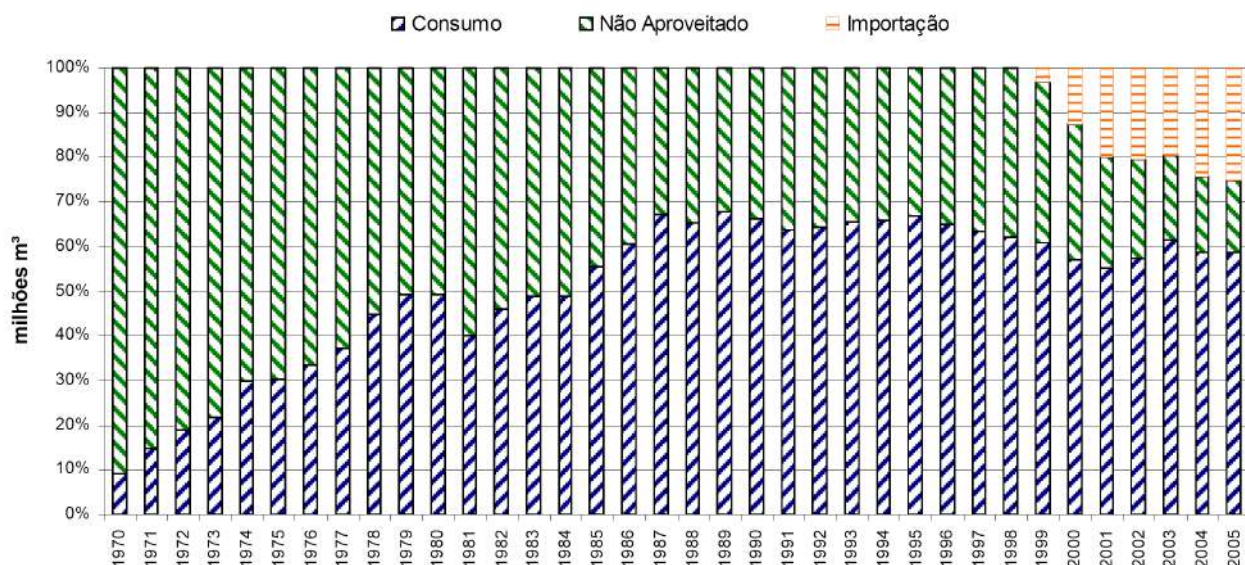


Figura 1.5 – Perfil de produção do GN no Brasil de 1970 - 2005 (Branco,2008)

De 1992 até 1997, vários projetos reduziram a queima de Gás Natural em quase 1 milhão de m³/dia. Durante esse período a legislação sobre o assunto tornou-se mais

rigorosa enquanto que diversos estudos foram realizados com o objetivo de analisar as causas da queima gás (Branco, 2008)

Visando minimizar o quadro da queima de gás no Brasil, a Petrobras e o governo federal definiram metas para o aproveitamento do Gás Natural. As melhores soluções para a redução da queima de gás foram reunidas num plano de ação em 2001, o Programa de Ajuste para a Redução de Queima de Gás Natural (POAG). Entre estas ações estão: a instalação e *revamp* de compressores de gás, a construção de novos gasodutos e a otimização das plantas de processamento de Gás Natural. O potencial de ganho na utilização do gás foi de 4,2 milhões de m³/dia, com um investimento aproximado de US\$ 200 milhões. Além do programa POAG, foram investidos US\$ 98 milhões em dois projetos de reinjeção de gás. Em caso de problemas de processamento, de transporte ou de comercialização *onshore*, um volume de 2,4 milhões de m³/dia do gás associado pode ser estocado para evitar a sua perda. (Branco, 2008)

Com o objetivo de acompanhar o crescimento do consumo brasileiro de Gás Natural, que deverá atingir 99 milhões de m³/dia em 2011 e está concentrado nas regiões Sul e Sudeste, a Petrobras tem como meta ampliar a produção atual de 28 milhões de m³/dia para 70 milhões de m³/dia em 2011. Assim, pode-se aumentar a segurança no abastecimento do mercado nacional sem que haja uma dependência tão forte do Gás Natural importado (PETROBRAS, 2007). A Petrobras está implantando o Plano de Antecipação da Produção de Gás (PLANGAS), que é constituído por um conjunto de projetos de exploração e produção, processamento e construção de infraestrutura para o transporte de Gás Natural nas regiões Sul e Sudeste e ampliará a oferta de gás nacional no Sul e Sudeste em duas etapas (ONIP, 2006). A primeira etapa, o PLANGAS 2008 permitirá um aumento do volume de Gás Natural de 16 milhões de m³/dia para 40 milhões de m³/dia e alcançará, por meio do PLANGÁS 2010, o volume de 55 milhões m³/dia (PETROBRAS, 2007). Os projetos serão implantados principalmente na Bacia do Espírito Santo, mas a Bacia de Campos também terá papel importante, principalmente com a utilização do gás associado produzido por plataformas no Campo Marlim Sul e Roncador e na área do ESS-130, que fica na parte capixaba da Bacia. Será um aumento de 6 milhões de m³/dia em relação ao volume atual (PETROBRAS, 2007). A Figura 1.6 mostra uma visão geral de todos os projetos do PANGÁS até 2010.



Figura 1.6 – Projetos do PLANGÁS até 2010 (Branco,2008)

A análise desse cenário é importante porque envolve um plano estratégico para atender a necessidade de abastecimento de gás para o país. A estratégia adotada influenciará diretamente na tecnologia que será utilizada para o aproveitamento das reservas. Por exemplo, a escolha pela utilização de uma planta GTL para o aproveitamento do Gás Natural remoto, associado ou não, envolve a mudança do tipo de produto que será fornecido.

1.1.4 - Transporte

Um dos grandes desafios no desenvolvimento da camada pré-sal será o imenso volume de Gás Natural contido na bacia de Santos, primeira região que será explorada com foco no campo de Tupi, único dos sete já perfurados a ter reservas conhecidas, entre 5 e 8 bilhões de barris de óleo equivalente (petróleo e gás). Este volume de gás é muito maior do que na bacia de Campos, e novos projetos que se adaptem a esta nova realidade terão de ser desenvolvidos.

Uma das opções, a construção de um gasoduto, seria limitada pelo volume transportado. A solução poderá passar pela combinação de duas tecnologias. A outra seria a transformação do gás em Gás Natural Liquefeito (GNL), para aproveitar os terminais de regaseificação que a PETROBRAS apresenta em seu planejamento estratégico. Este projeto seria transformar em GNL o excedente, uma parte vai para o gasoduto e uma parte vai para fazer GNL (Luna, 2008).

Mesmo assim a logística necessária para transportá-lo para o mercado consumidor, devido à distância dos reservatórios da costa (cerca de 300 quilômetros) e o elevado custo para liquefazer este gás em grandes proporções em alto mar, é um dos pontos negativos do GNL.

Outra alternativa estudada é adotar a tecnologia de transformação de Gás Natural em óleo sintético como forma de melhor aproveitar o montante do combustível existente no pré-sal da Bacia de Santos. A alternativa, segundo especialistas do setor, permite comprimir um maior volume de gás em menor espaço, o que facilita seu transporte (Jornal do Comércio, 2008).

O exposto acima mostra as diversas possibilidades para desenvolvimento da produção de Gás Natural no Brasil, que está por vir com os novos campos do pré-sal. Qualquer que seja a tecnologia adotada para o transporte, ou uma combinação delas, o desenvolvimento tecnológico se faz necessário para otimizar os recursos nesta indústria intensiva que é a Indústria do Petróleo e Gás.

Adicionalmente, o desenvolvimento destas tecnologias não pode estar restrito somente ao GN proveniente dos campos *offshore*, o conhecimento adquirido em pesquisa e desenvolvimento (P&D) e engenharia básica, permitem a diversificação da matriz brasileira para aproveitamento de todo o GN processado no Brasil. Isto permite a possibilidade de inserção de novas indústrias no país e a geração de novos produtos, todos tendo o Gás Natural como fonte primária. Dentre eles podemos destacar o Metanol, DME e produtos de elevada qualidade obtidos pela rota GTL, como nafta petroquímica, diesel Premium, óleos lubrificantes de alta performance além de parafinas.

A seguir, algumas opções de uso do Gás Natural através de conversões físico-químicas são detalhadas, dentre elas o metanol, GNL, GTL e DME. É importante notar que apesar do GNL não ser um produto que utiliza o GN como matéria-prima, é sim um processo utilizado para viabilizar seu transporte em determinadas condições, como grandes distâncias, mas que ao final o consumo será na prática o próprio GN.

Independente da disponibilidade de gás brasileiro *offshore*, o conhecimento desta tecnologia pode ser empregado nos terminais de regaseificação que serão instalados no Brasil para compra de GNL do exterior, diminuindo a dependência de outros setores, como do GN proveniente da Bolívia.

1.2 - Alternativas de uso do Gás Natural

Além do uso em síntese Fischer Tropsch, objeto de análise deste trabalho, o GN possui diversas aplicações na geração de energia, na indústria, nas residências e no transporte. A seguir algumas destas possibilidades são expostas, incluindo o transporte do GN dos campos *offshore* através da liquefação.

1.2.1 - Gas to Liquids (GTL)

Devido a pressões ambientais, econômicas e também a necessidade de utilização de outras fontes de energia que não aquelas derivadas do petróleo outras tecnologias de utilização do Gás Natural vêm sendo estudadas. Vale ressaltar que qualquer destino para o Gás Natural passa obrigatoriamente pelo seu transporte.

A busca por novas opções gerou trajetórias distintas para o Gás Natural e entre estas 3 podem ser apontadas como as mais importantes:

- a) transporte do Gás Natural por dutos;
- b) liquefação e transporte do Gás Natural liquefeito (GNL);
- c) conversão química e transporte dos combustíveis sintéticos (GTL).

O transporte do próprio gás por dutos necessita de grande investimento e manutenção além da questão da integração espacial extremamente rígida. Por outro lado, o transporte do gás liquefeito (GNL) implica a existência de um processo de conversão na distribuidora do gás e depois um processo de reconversão no destino (Almeida et al, 2002).

Metade das reservas provadas de gás natural no mundo não terão mercado num futuro próximo, porque estão localizadas em regiões de difícil acesso. Portanto, essa

característica é um motivador econômico para o uso da tecnologia GTL, pois ela permitiria o aproveitamento daquelas reservas de gás que por possuírem volumes pequenos e dispersos e/ou por estarem em regiões distantes dos centros de consumo não apresentarão viabilidade técnico-econômica no curto prazo (Moritis, 1999).

A tecnologia GTL consiste em uma conversão química do Gás Natural em um líquido estável por meio da síntese de Fischer-Tropsch (FT). Através desta conversão é possível obter produtos que podem ser consumidos diretamente como combustível (como por exemplo, diesel) ou produtos especiais tais como bases lubrificantes.

O aumento das restrições ambientais também é um elemento central nas transformações do ambiente de seleção tecnológica que vêm impulsionando o desenvolvimento da tecnologia GTL. Os combustíveis e produtos especiais feitos através desta tecnologia são mais limpos que os mesmos produzidos a partir de refino do petróleo e ainda apresentam baixo nível de poluentes, principalmente o enxofre.

O processo de GTL pode ser dividido em 3 etapas interdependentes:

- 1) Produção do gás de síntese;
- 2) Síntese de Fischer-Tropsch;
- 3) Hidroprocessamento.

Apesar de a produção de gás de síntese ser um processo comum na indústria petroquímica, a tecnologia GTL exige a produção de gás de síntese em escalas muito superiores e com custos muito inferiores aos das aplicações usuais. A fase de produção de gás de síntese pode corresponder de 40 a 50% dos custos de capital de uma planta GTL (Almeida, 2003). Estes valores podem chegar até 60 ou 65% quando consideramos a geração a partir dos processos de gaseificação.

O processo de conversão do gás de síntese em hidrocarbonetos baseia-se no processo Fischer-Tropsch (FT). O processo FT produz uma mistura de hidrocarbonetos de cadeias longas com pesos moleculares variados. Os catalisadores e os tipos de reatores vêm exercendo papel fundamental na melhoria do processo. E ainda como a reação de conversão é extremamente exotérmica, várias pesquisas têm sido realizadas com o objetivo de desenvolver novas configurações dos equipamentos e permitir um aproveitamento energético mais eficiente.

O hidroprocessamento é utilizado para o tratamento dos produtos da tecnologia de FT. A hidrogenação das olefinas e dos compostos oxigenados, além do hidrocrackeamento da cera, pode ser realizada em condições não muito severas, com a

produção de nafta e óleo diesel entre outros. São vários os fornecedores desta tecnologia, largamente utilizada nas operações tradicionais de refino.

Um dos pontos freqüentemente apresentados como chave na tecnologia GTL envolve a questão da escala. A indústria química de maneira geral e histórica está sempre orientada para produzir grandes volumes - grande escala - e desta forma conseguir ganhar significativa redução nos custos. Ainda não se pode dizer que exista uma definição de escala ótima para o GTL. Alguns especialistas e algumas grandes empresas adotam que a produção mínima da uma planta destas deve ser em torno de 60.000 bpd (Rockwell, 2002). Porém, a capacidade máxima de geração de gás de síntese por *train* (unidade de processo) está em 7.500 bpd de óleo sintético e a conversão em 20.000 bpd, levando em conta os processos utilizados hoje comercialmente. Portanto, para uma planta de 60.000 bpd seria necessária a utilização de diversos *trains* de geração de gás de síntese, oito no total, e com isto grande parte da economia de escala teoricamente possível seria perdida.

Para permitir que os benefícios da economia de escala fossem alcançados, seria importante aumentar as capacidades atuais dos processos. O processo de produção de gás de síntese é o primeiro da linha do GTL e como já foi dito representa significativa parte do investimento da planta e não tem escala suficientemente grande para o GTL. Vários estudos vêm sendo feitos para aumentar a capacidade por trem de produção de gás de síntese, desde melhorar e ampliar a escala do processo atual até propostas de novas tecnologias (Souza, 2004).

Uma unidade GTL é capaz de processar por dia 30 milhões de metros cúbicos, produzindo 100 mil barris diários. O valor do investimento em uma unidade deste porte seria em torno de US\$ 3 bilhões. Como comparação, a tecnologia para a produção do GNL, que pode também ser transportado em navios e precisa ser regaseificado no local de destino, tem um custo estimado em torno de US\$ 2 bilhões para uma unidade que processa 7 milhões de metros cúbicos por dia (Jornal do Comércio, 2008), ou seja uma unidade GTL pode processar quase 3 vezes mais metros cúbicos por dia de gás, do que uma unidade de GNL, considerando o mesmo valor investido.

Além do custo menor de instalação da unidade de processamento, a vantagem do sistema GTL, segundo especialistas, é o elevado valor que se pode agregar a ele. Isso porque o óleo sintético produzido a partir do GTL possui uma quantidade menor de enxofre, embora não possa ser comercializado diretamente sem ser misturado ao diesel tradicional, devido à perda em propriedades como lubricidade e densidade. Assim, o

produto adicionado ao diesel permite uma melhor qualidade final, atendendo às recentes especificações dos Estados Unidos e Europa que exigem uma emissão máxima de 50 partículas por milhão (ppm) ante as 500 ppm emitidas hoje no diesel nacional (Jornal do Comércio, 2008).

O GTL offshore é uma tecnologia importante e que pode ser adotada em larga escala na área do pré-sal, porque pode ser embarcado para exportação direta dali para o mercado europeu e norte-americano, porém outras tecnologias estão sendo estudadas para serem adotadas em conjunto na área do pré-sal na Bacia de Santos. Isto implica num mix de uma série de tecnologias, entre elas o GTL, o GNL, oleodutos e até a construção de usinas térmicas em alto-mar para o abastecimento das plataformas que atuarem na região (Jornal do Comércio, 2008).

1.2.2 - Gás Natural Liquefeito (GNL)

Algumas das principais mudanças observadas nos últimos anos na indústria de Gás Natural no Brasil e no mundo dizem respeito ao aumento da penetração do gás na matriz energética de diferentes países e a opção cada vez mais utilizada de comercialização via Gás Natural Liquefeito (GNL).

O processo de liquefação do Gás Natural é datado do século XIX quando o químico e físico britânico Michael Faraday realizou experimentos de liquefação de diversos tipos de gases, incluindo o Gás Natural, e a construção, pelo engenheiro alemão Karl Von Linde, do primeiro compressor de refrigeração prático em Munique no ano de 1873. A primeira planta de liquefação de Gás Natural foi construída na Virgínia Ocidental em 1912, com início de operação em 1917. Já a primeira planta de escala comercial de liquefação foi construída em Cleveland, Ohio, em 1941, com o Gás Natural estocado em tanques a pressão atmosférica. A liquefação do Gás Natural tornou possível, dessa forma, seu transporte a grandes distâncias. Em janeiro de 1959, o primeiro navio-tanque de GNL, o *Methane Pioneer*, transportou uma carga do Lago Charles, Louisiana, para a Ilha Canvey, no Reino Unido, dando início à atividade de transporte comercial de GNL através de grandes distâncias (ANP, 2008b).

O processo de liquefação requer a remoção de impurezas do GN como gás carbônico, enxofre, nitrogênio, mercúrio e água, além do condensado, o que ocorre na

unidade de tratamento. O processo inclui a separação do gás liquefeito de petróleo (GLP), basicamente propano e butano, que poderá ser vendido como produto final ou reinjetado no GNL, dentro dos limites de solubilidade ou de especificação do produto. Como resultado, o GNL é tipicamente composto em sua maior parte de metano (98%) (Souza, 2007).

O elemento central de um projeto de GNL é a unidade de liquefação (Figura 1.7). Neste processo, a temperatura do Gás Natural é reduzida a -161°C , com uma redução de volume de cerca de 600 vezes. Esta instalação, construída próxima de locais de bom calado (mínimo 14 m), em baía abrigada, e o mais próximo possível dos campos produtores, compõe-se basicamente, de uma unidade de tratamento, do conjunto de trocadores de calor e dos tanques de armazenagem (Souza, 2007).

O conjunto de trocadores de calor, peça principal da liquefação, funciona segundo o mesmo princípio de um refrigerador doméstico. Um gás refrigerante (em geral, uma mistura de metano, etano e propano) é pressurizado e em seguida expande-se através de uma válvula (Efeito Joule-Thompson), extraindo calor do Gás Natural que chega aos trocadores de calor. Há diferentes tipos de trocadores, mas quase todas as instalações dividem-se em conjuntos paralelos (trens de GNL), capazes de liquefazer de 2,0 a 2,5 Mtpa (*Million Tonnes per Annum*) cada um. Os mais recentes "trens de liquefação" tendem a ter dimensões bem maiores, como a terceira unidade de Ras Laffan, no Qatar, inaugurada em 2004 com capacidade de 4,7 Mtpa.

A liquefação também fornece a oportunidade de armazenar o Gás Natural para o uso durante períodos de elevada demanda nas áreas onde as circunstâncias geológicas não são apropriadas para desenvolver facilidades subterrâneas de armazenamento de gás. Nas regiões onde a capacidade da rede de gasoduto para suprimento das áreas pode ser muito cara e o uso é altamente sazonal, a liquefação e o armazenamento de GNL ocorrem durante períodos fora de pico (*off-peak*) para reduzir os custos durante esses períodos (Souza, 2007).



Figura 1.7 – Unidade de liquefação (Souza, 2007)

Os navios que levam o GNL das unidades de liquefação aos pontos de regaseificação, navios metaneiros, dispõem de reservatórios isolados, capazes de suportar a temperatura do gás durante o transporte, não havendo refrigeração na viagem. Há uma perda que, mesmo nos navios mais modernos, vai a 0,1% ao dia. Além disto, essa perda de GNL é normalmente usada como combustível.

Há dois tipos básicos de transportadores de GNL, o que armazena o gás em esferas (o tipo Moss Rosenberg), e os que têm tanques nas posições convencionais de petroleiros, o tipo membrana, não havendo diferenças substanciais de custo inicial ou operação. A capacidade usual por navio é de 125 a 135 mil m³, que correspondem a 55 a 60 mil toneladas de GNL.

Alternativamente, o transporte de GNL pode ser realizado por gasoduto (*pipeline*), que poderá transportar o GN após o processo de liquefação dos campos no mar para o continente. Ao chegar em terra, este tipo de GNL transportado por tubulação submarina poderia aproveitar os terminais de regaseificação que serão instalados no Brasil para receber os navios metaneiros, bem como toda a infra-estrutura de distribuição *onshore* que será montada para atender a esta nova oferta de gás.

No terminal de regaseificação, ilustrado na Figura 1.8, o Gás Natural liquefeito é recebido dos navios metaneiros, armazenado (líquido) em tanques de estocagem especiais, vaporizado e enviado o Gás Natural para os gasodutos de distribuição.

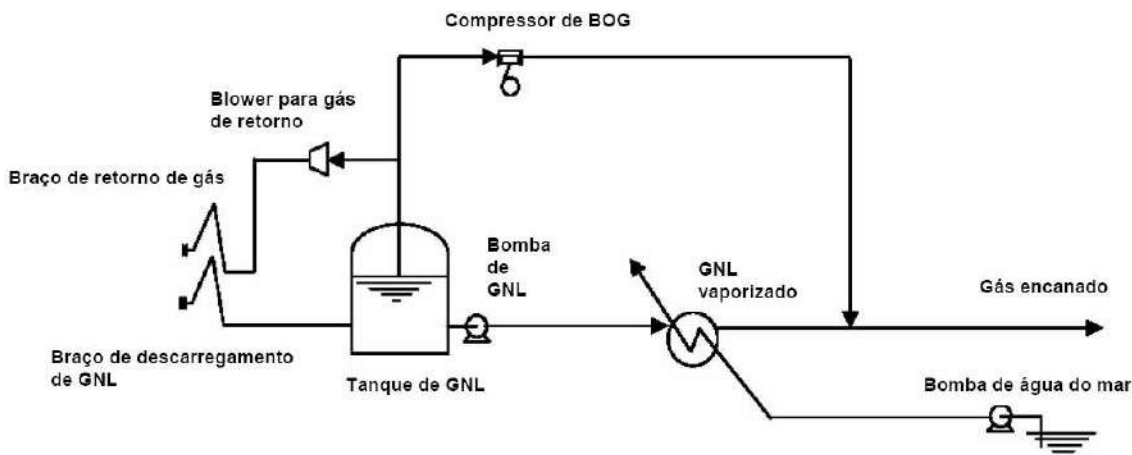


Figura 1.8 – Processo de regaseificação de GNL (Souza, 2007)

Em que pese os elevados custos historicamente associados à comercialização de GNL, verifica-se que aos poucos esta alternativa começa a se viabilizar em países como o Brasil, por exemplo, trazendo mudanças no que tange a contratos e preços (ANP, 2008b).

A comercialização de GNL já ocorre há mais de 40 anos, não sendo, portanto, uma novidade na indústria mundial do Gás Natural. Ocorre, porém, que após a súbita perda de interesse por esta opção na década de 80 e parte da década de 90, observou-se nos últimos anos um recrudescimento desta modalidade de comercialização, em função da demanda na Bacia do Atlântico, em especial, dos Estados Unidos.

Como mencionado, o ressurgimento do GNL deve-se, em grande parte, à busca dos países pela diversificação das fontes energéticas e à necessidade de flexibilização da oferta de gás com vistas a assegurar a segurança do abastecimento em um ambiente de elevação do preço internacional do petróleo, que em 2007 alcançou um patamar próximo ao observado após o choque da década de 70, já considerada a inflação.

No Brasil, a comercialização de GNL é ainda nascente. Além do Projeto Gemini, implementado no ano de 2005, encontram-se atualmente em construção, pela PETROBRAS, dois terminais de regaseificação, como um primeiro passo para o desenvolvimento deste mercado (ANP, 2008b).

1.2.3 - Metanol

O metanol (CH_3OH) é um líquido incolor, volátil e com odor alcoólico levemente adocicado, sendo o mais simples dos álcoois alifáticos, possuindo apenas um átomo de carbono em sua estrutura molecular. Sua reatividade é determinada pelo grupo funcional hidróxi, sendo, portanto completamente miscível em água, álcoois, ésteres e na maior parte dos solventes orgânicos, além de possuir uma razoável solubilidade em óleos e gorduras. Devido a sua polaridade, o metanol dissolve diversas substâncias inorgânicas (Camargo, 2007).

As duas aplicações mais importantes do metanol estão relacionadas ao setor químico e ao seu uso como fonte de energia, de forma direta ou indireta. Seu uso como combustível automotivo e também, em célula combustível é uma forma direta de energia. Já a sua síntese para a obtenção do dimetil éter (DME) e do metil-terc-butil éter (MTBE) e sua conversão em gasolina, através do processo Methanol to Gasoline (MTG), são consideradas aplicações indiretas de seu uso como energético.

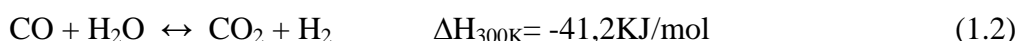
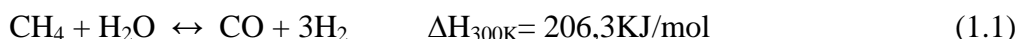
Uma terceira aplicação do metanol é no setor petroquímico para a obtenção de olefinas leves, etileno e propileno, através do processo denominado Methanol to Olefins (MTO). Este processo ainda não é muito difundido, encontrando-se em fase de aprimoramento, principalmente, pela empresa UOP. Atualmente, as empresas petroquímicas de primeira geração acreditam que este processo pode ser uma forma de diversificar as fontes de matéria-prima a ser utilizada na obtenção de olefinas leves (Gerosa, 2007).

Segundo dados de Camargo (2007), a produção brasileira de metanol, em 2005, foi da ordem de 250 mil toneladas, concentrada em duas empresas brasileiras, que juntas perfazem mais de 95% da capacidade de produção no Brasil: a Metanor S.A. – Metanol do Nordeste, localizada no Pólo Petroquímico de Camaçari, no estado da Bahia, com capacidade instalada de aproximadamente 90 mil toneladas por ano, e a Prosint, pertencente ao Grupo Peixoto de Castro, localizada no estado do Rio de Janeiro, com capacidade instalada de aproximadamente 162 mil toneladas por ano. Ambas operam no limite da sua capacidade instalada de produção. A importação de metanol para o mesmo ano foi de cerca de 250 mil toneladas, grande parte proveniente das instalações localizadas em Punta Arenas, no Chile. O transporte do produto é realizado via marítima, com destino aos portos de Paranaguá (PR), Rio Grande (RS), Aratu (BA) e Rio de Janeiro (RJ).

Atualmente encontramos diversas rotas utilizadas na síntese de metanol, sendo o gás natural a matéria-prima mais utilizada na produção deste álcool em todo o mundo,

inclusive no Brasil. Os processos desenvolvidos pelas empresas BASF, Dupont e ICI (Imperial Chemical Industries), os quais foram utilizados durante 40 anos, segundo Gerosa (2007), eram baseados na tecnologia desenvolvida entre os anos de 1913-23, operavam sob alta pressão (25-35 MPa) e temperaturas na faixa de 320-450°C. Em 1960, a ICI desenvolveu uma rota para a síntese do metanol a partir de um gás de síntese isento de compostos sulfurosos, que continha uma grande quantidade de dióxido de carbono, passado através de um catalisador de óxido de cobre, altamente seletivo. Essas modificações proporcionaram reduções na pressão e na temperatura de operação: 5-10 MPa e 200-300°C, respectivamente. Esta tecnologia, mundialmente utilizada nos dias atuais, é conhecida como *Low-Pressure*.

As etapas de produção do metanol compreendem a geração de gás de síntese, a síntese do metanol e destilação dos produtos de reação. A geração de gás de síntese promove a produção de uma mistura de gases a partir da reforma a vapor do gás natural com ausência de oxigênio, sobre um leito catalítico de níquel. A corrente de entrada é composta por cerca de 98% em volume de metano livre de impurezas, tais como compostos a base de enxofre, entre outros. A composição média do gás de síntese, após a reforma, é de aproximadamente, 15% de CO, 8% de CO₂, 74% de H₂ e 3% CH₄, em volume. As principais reações envolvidas são (Camargo, 2007):



A etapa de síntese converte o gás de síntese em metanol através da reação da mistura de óxidos de carbono com o hidrogênio sobre um leito catalítico de cobre, zinco e alumínio, na proporção 61:30:9, respectivamente. Esta parte do processo requer uma alimentação adicional de gás carbônico para promover o controle cinético da reação de síntese, aumentando a conversão de gás de síntese em metanol (Camargo,2007).

As principais reações envolvidas são:



A etapa seguinte compreende o processo de destilação fracionada dos produtos de reação de metanol, promovendo a separação do produto principal das demais

impurezas obtidas do processo anterior, tais como compostos orgânicos leves e água, entre outros.

Existe uma grande interação entre as três etapas acima apresentadas devido à extensiva recuperação de calor e reciclo de vapor entre elas, sendo a subdivisão das etapas meramente didática (Camargo, 2007).

Principais Produtos

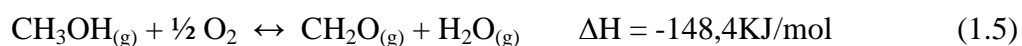
I – Dimetil Éter (DME)

A rota mais comum para a produção de DME é a sua obtenção a partir da desidratação do metanol, sendo este último, geralmente, obtido a partir do GN, pela transformação do gás de síntese em metanol, conforme operação descrita acima. O DME, contudo ainda pode ser obtido sem a necessidade de formação de metanol, conforme será exposto mais a frente.

Segundo Gerosa (2007), o DME apresenta grande versatilidade quanto ao seu uso, como na indústria química para a fabricação de formaldeído, seu uso como energético, principalmente, como substituto do GLP e óleo diesel de refinaria, e também, no setor petroquímico para a obtenção de olefinas leves como etilenos leves como etileno, propileno e butadieno. Esta gama de aplicação do DME deve-se ao fato de suas características físico-químicas, serem mais próximas as do GN e GLP.

II - Formaldeído

O formaldeído, CH_2O , é considerado como um dos mais versáteis produtos químicos, podendo seu uso, ser direcionado a várias finalidades. É o mais simples e o mais reativo dos aldeídos. Este é obtido através da oxidação catalítica do metanol, conforme reação abaixo.



Ele pode ser utilizado na fabricação de resinas (adesivas e aglomerantes), quando reagido com uréia, fenol e melaninas. Estas resinas são aplicadas na indústria moveleira, principalmente na produção de aglomerados, compensados e móveis mais

rústicos. Também podem ser usadas nas indústrias têxteis, de borracha, entre outras. Como intermediário químico aplicado na síntese de trimetilolpropano e neopentil glicol, os quais são aplicados na fabricação de poliuretano e poliéster, resinas sintéticas e óleos lubrificantes sintéticos. A aplicação direta do formaldeído ocorre como agente inibidor de corrosão nas indústrias metalúrgicas, na produção de filmes fotográficos, fabricação de circuitos impressos, entre outros (Gerosa, 2007).

III – Ácido Acético

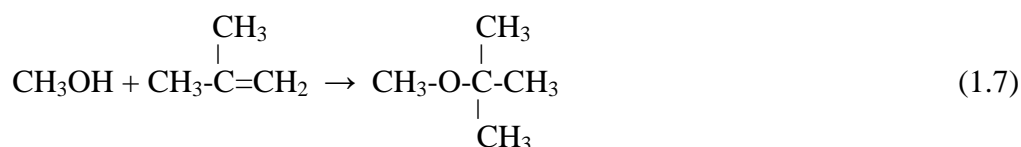
A carbonilação do metanol é, atualmente, a principal rota para a produção de ácido acético. Este é um processo exotérmico, onde o metanol é reagido com monóxido de carbono, conforme mostrado abaixo.



Conforme Gerosa (2007), a maior parte do ácido acético é utilizado para a produção de acetato de vinila, que é aplicado na produção de adesivos, filmes, papel e tecidos. O ácido cloroacético é utilizado na manufatura de produtos químicos, como glicerina, celulose, carboxi-metil. Outros importantes derivados são os ésteres de ácido acético, anidrido acético. Outros setores nos quais o ácido acético é aplicado são: farmacêuticos, fabricação de tintas e corantes e inseticidas.

IV – Metil-terc-butil éter (MTBE)

O MTBE é produzido através da reação do metanol com um isobutano, conforme reação abaixo.



Durante o processo, ocorrem as reações de hidratação do isobuteno em terciário butil álcool simultaneamente, com a desidratação do metanol em dimetil éter. Em muitos casos, os produtos destas reações aparecem como subprodutos do processo.

Seu maior consumo é como aditivo da gasolina automotiva. Sua adição a este combustível ocorre devido ao seu alto número de octanas, causando uma redução na quantidade de CO e hidrocarbonetos não reagidos, eliminados na combustão da gasolina (Gerosa, 2007).

V - Hidrocarbonetos

A conversão do metanol em hidrocarbonetos do grupo $(CH_2)_n$ (parafinas + olefinas + aromáticos) pode ser descrita pela reação abaixo.



Temos, então, o surgimento de dois processos distintos: Methanol to Gasoline (Metanol para Gasolina) – MTG e o Methanol to Olefinas (Metanol para Olefinas) – MTO (Gerosa, 2007).

1.2.4 - DME

O éter dimetílico ou dimetil éter (DME) é o mais simples dos éteres e de forma estrutural CH_3OCH_3 . É usualmente utilizado como um propelente de aerossol na indústria de cosméticos e de tintas.

Por um longo período, o único uso industrial de DME foi a conversão em dimetil sulfato, produto bastante usado na indústria agrícola. Entretanto, nos últimos anos, esforços crescentes estão sendo feitos com o intuito de aprimorar a tecnologia de conversão de gás natural em combustíveis líquidos. Isso porque existe uma crescente demanda mundial por combustíveis mais limpos. Além disso, existe o fato de se gerar tecnologia alternativa para monetizar as reservas irrecuperáveis de gás natural. Dentro deste cenário, o DME tem atraído uma larga atenção mundial em função do seu potencial como mais uma fonte alternativa de energia.

Durante muitos anos, a conversão do DME em dimetil sulfato pelo tratamento com trióxido de enxofre, para utilização em indústria agrícola, foi o único uso industrial do DME. De 20.000 toneladas produzidas em 1986 na Europa Ocidental, cerca de 45%

(9.000 toneladas) foram utilizadas na produção de dimetil sulfato (Oliveira, 2005). O uso do DME em aerossol passou a ter grande importância e aplicação comercial após o ano de 1980. Por não ser tóxico e ambientalmente benigno, tem se beneficiado da redução do uso do cloro-flúor carbono (CFC). Atualmente, o uso em aerossol, ainda é a principal aplicação do DME (cerca de 70% de todo o DME produzido é usado para este fim) (Oliveira, 2005). Segundo Appel et al (2005), O emprego do DME como propelente está ligado a algumas de suas propriedades, como a de se liquefazer a pressões relativamente baixas, ser praticamente inofensivo a saúde humana, não prejudicar a camada de ozônio, ter excelente solubilidade em substâncias polares e não-polares, apresentar comportamento azeotrópico com alguns solventes e propelentes, bem como o seu efeito anti-congelante, os quais promovem sua utilização na formulação de aerossóis baseados em água ou em solventes.

Recentemente, o DME tem atraído uma larga atenção mundial em função do seu potencial emprego como combustível. O DME possui características físicas semelhantes às do GLP, ou seja, nas condições normais de temperatura e pressão, apresenta-se em estado gasoso, porém, quando é submetido a pressões mais elevadas ou a temperaturas mais baixas, se liquefaz facilmente.

O DME também tem despertado a atenção mundial em função do seu potencial como alternativa ao diesel. O óleo diesel é um composto derivado do petróleo, cujo principal parâmetro de qualidade como combustível é medido através do número de cetana, que é uma medida similar ao número de octana para a gasolina.

Além disso, o DME também pode ser usado como matéria-prima na obtenção de ácido acético, na produção de olefinas, especialmente eteno, propeno e buteno. No caso das olefinas, encontramos em Appel et al (2005) que existem duas possibilidades a formação direta a partir do metanol ou a síntese via DME. Vale destacar que o uso do DME é mais conveniente, principalmente, do ponto de vista do processo, porque quando a síntese de olefinas ocorre a partir do metanol, a exotermicidade das reações envolvidas é elevada exigindo o emprego de reatores especiais. No caso do emprego do DME como matéria-prima esta questão não se coloca, ou seja, o controle térmico da reação é mais simples, o que sem dúvida diminui os custos do processo.

Outra aplicação em estudo para o DME é como fonte de hidrogênio em células de combustível. A tecnologia de células de combustível envolve a conversão direta de energia química através da reação de hidrogênio e oxigênio em energia elétrica. Em unidades estacionárias, estudos apontam que as células de combustível geram energia

com uma eficiência de aproximadamente 35%, ou seja, um valor superior à eficiência obtida através de micro turbinas a gás que é de cerca de 25%. Além disso, alguns desenvolvimentos já apontam para uma eficiência energética de cerca de 30% contra um valor de 15 a 20% para os motores a gasolina (Oliveira, 2005).

Alguns países têm investido no uso do DME como combustível em termelétricas para geração de energia. A energia elétrica pode ser produzida a partir do calor gerado durante a combustão do DME em turbinas a gás. Nesse caso, como se trata de um combustível gasoso, a geração de eletricidade é mais eficiente, além de não serem necessários tratamentos posteriores de resíduos sólidos, como, por exemplo, no caso das cinzas geradas pelo uso do carvão (Appel et al, 2005).

No Brasil, o DME se coloca, como um dos possíveis candidatos à substituição do diesel. Com efeito, o DME poderia vir a ser uma alternativa ao diesel mineral em regiões onde a logística de distribuição é prejudicada pelas grandes distâncias dos centros de produção, como é o caso do centro-oeste brasileiro, e ainda nos grandes centros urbanos onde a questão do meio ambiente ou mais especificamente da qualidade do ar tem grande importância. Em particular, neste caso o efeito provocado sobre a emissão de materiais particulados seria bastante expressivo.

Embora haja disponibilidade de gás natural na região centro-oeste do país, muitas cidades não são atendidas por gasodutos. Além disso, mesmo em cidades servidas por gás natural, como Campo Grande e Cuiabá, o mercado de GLP é significativo, de forma similar ao que ocorre em São Paulo, onde existe uma ampla malha de distribuição de gás canalizado. Finalmente, a produção integrada de fertilizantes, DME e biodiesel merecem atenção, uma vez que a combinação de processos permite reduzir custos e agregar valor ao gás natural e à biomassa (Oliveira, 2005).

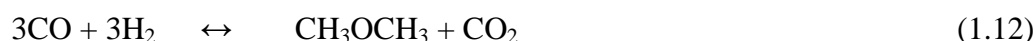
O éter dimetílico é obtido a partir do gás de síntese, proveniente do processo de reforma do gás natural ou da gaseificação do carvão e da biomassa (biodme). Os processos de obtenção do DME consideram, basicamente, a possibilidade da síntese ser conduzida em uma ou duas etapas. A abordagem mais convencional baseia-se na obtenção inicial de metanol a partir do gás de síntese (reação 1.9), seguida por uma etapa de desidratação deste álcool (reação 1.10); ambas as reações ocorrem na presença de um catalisador. O processo em uma única etapa, também chamado de rota direta, envolve a conjugação destas reações em um único reator.



A maturidade da tecnologia disponível para obtenção de metanol e a relativa simplicidade da desidratação deste álcool são os grandes atrativos do processo em duas etapas.

Ao se considerar um processo em duas etapas deve-se observar que uma das grandes vantagens dessa concepção é a possibilidade de combinação de uma unidade de desidratação às plantas existentes de metanol. Sistemas integrados compostos de dois reatores são, de fato, propostos por algumas empresas (Appel et al, 2005).

O processo por síntese direta ocorre em temperaturas entre 210 – 290°C, em pressões em torno de 3 a 10 MPa e exige a utilização de catalisadores bifuncionais ou mistura de catalisadores. Tais catalisadores devem apresentar tanto características ditas hidrogenantes, permitindo a síntese do metanol, quanto desidratantes, sendo estas responsáveis pela formação do DME. Nesses sistemas, além das reações 1.9 e 1.10, deve-se considerar ainda a reação de deslocamento do gás d'água (reação 1.11); tais reações ocorrem concomitantemente, sendo a equação global do processo descrita pela reação 1.12.



Adicionalmente, podemos encontrar ainda em Appel et al, (2005), que a síntese direta do DME, bem como a síntese do metanol são muito exotérmicas e, portanto, liberam grande quantidade de calor. As questões ligadas à transferência de calor afetam diretamente o desempenho desses sistemas, seja do ponto de vista das limitações termodinâmicas, seja devido à estabilidade dos catalisadores. Portanto, a remoção do calor e a manutenção de uma temperatura constante adequada no reator aparecem como um dos desafios de engenharia. Com efeito, diferentes tipos de reatores têm sido propostos para esses processos.

Após conhecer algumas das opções tecnológicas para aproveitamento do Gás Natural, e ainda que os investimentos definidos pela PETROBRAS (2007) sinalizem uma estratégia de aproveitamento de todo o gás que será produzido de acordo com o PLANGÁS, com redução expressiva da parcela não aproveitada, a tecnologia GTL foi

escolhida para o estudo de viabilidade na Bacia de Campos. Os motivos para esta escolha foram as características de produção do gás, o percentual da participação na produção nacional, o percentual atual de queima e de perdas, no tipo e qualidade dos produtos que podem ser obtidos, na proximidade do mercado e no fato da PETROBRAS sinalizar que o GTL é uma possível tecnologia a ser implementada para ajudar a desenvolver os campos do pré-sal. Ademais, trata-se da bacia para a qual existe a maior disponibilidade de dados.

2 - Gas to Liquids (GTL)

A busca para se obter hidrocarbonetos líquidos a partir de outras fontes de matéria orgânica vem sendo estudada desde o início do século XX, como consequência da crescente demanda por derivados de petróleo e pelo fato do petróleo não estar distribuído igualmente entre os países. Como a Alemanha possui baixas reservas de petróleo em seu território, acabou sendo pioneira nesse desenvolvimento.

No Kaiser – Wilhelm Institute for Coal Research (KWI), dois pesquisadores, Franz Fischer e Hanz Tropsch, estudaram uma patente de 1913, da BASF, na qual era descrito um processo através do qual, hidrocarbonetos e compostos oxigenados eram obtidos pela redução catalítica do monóxido de carbono. Estes cientistas desenvolveram então uma série de experimentos, explorando diferentes variáveis. Durante a década de 20, vários resultados foram obtidos, sendo que em 1928 os pesquisadores obtiveram uma mistura de hidrocarbonetos gasosos e líquidos em condições de baixa temperatura e pressão atmosférica. Esse processo ficou conhecido como síntese de Fischer-Tropsch (FT) (Gomes et al, 2006).

Após esta descoberta e apesar do interesse em desenvolver a tecnologia, os estudos indicavam a inviabilidade econômica do processo frente às refinarias convencionais, que naquela época não possuíam as restrições que as atuais têm, como por exemplo, a redução de enxofre que acaba por encarecer o refino.

Segundo Pinheiro (2002), as principais experiências na síntese de FT ocorreram na Alemanha, Estados Unidos, Japão e África do Sul. De acordo com o estudo de Pinheiro (2002), durante o período do governo nazista na Alemanha, instituiu-se uma política onde a independência do petróleo foi colocada como objetivo central devido à escassez desse recurso no país. Como resultado dessa política agressiva, ao final da década de 30, foram instaladas nove empresas para obtenção de hidrocarbonetos líquidos a partir do carvão. Durante a 2ª Guerra Mundial, os combustíveis sintéticos respondiam por 50% das necessidades totais do país. Entretanto, como o caminhar da guerra, houve escassez de matéria-prima para a produção de catalisadores e algumas fábricas ainda foram bombardeadas, elevando o preço do combustível sintético, mesmo quando comparado ao petróleo importado.

Preocupado com o aumento do consumo de petróleo, em 1944 o governo dos Estados Unidos estabeleceu o Synthetic Fuels Act, que visava o abastecimento de petróleo a médio e longo prazo. Aproveitando-se do desenvolvimento tecnológico alemão em combustíveis sintéticos e gaseificação, diversos cientistas alemães foram incorporados ao projeto após o fim da Segunda Guerra Mundial. Isto permitiu ao governo e a iniciativa privada, a construção de um total de cinco plantas. Porém em 1955, devido a pressões políticas e econômicas, aliadas ao preço alto dos produtos sintéticos, quando comparados aos derivados do petróleo, optou-se por investir os recursos em outro segmento, como o desenvolvimento de novos campos de petróleo, encerrando assim o ciclo dos combustíveis sintéticos nos EUA.

Outro país motivado pela escassez de petróleo e aumento do consumo foi o Japão, que também se aventurou na indústria dos combustíveis sintéticos. O país tinha um ambicioso plano que pretendia construir 87 plantas em sete anos. Esta “pressa” fez com que os cientistas fossem diretamente da etapa de laboratório para a etapa industrial, sem passar pela etapa das plantas piloto. Desta forma, apenas 7 plantas foram construídas. A falta de metais para a produção de catalisadores e o alto custo para a importação de equipamentos, acabaram por contribuir para o término do investimento japonês.

A África do Sul é sem dúvida, o país com a experiência mais rica no que se refere à síntese de FT. Com uma indústria de combustíveis sintéticos à base de carvão de mais de 50 anos, que inclusive já utiliza parcialmente o Gás Natural como matéria prima. A criação da empresa South African Coal, Oil and Gas Corporation Limited, Sasol, para conversão do carvão em derivados como gasolina, diesel e petroquímicos, foi motivada entre outros fatores pela previsão de aumento do preço do barril de petróleo no mercado externo, pelas poucas reservas de petróleo no país e as grandes jazidas de carvão ali disponíveis. Outra forte motivação foi o embargo comercial imposto à África do Sul, devido à política de segregação racial conhecida como apartheid, que reduziu fortemente a possibilidade de importação de petróleo (Gomes et al, 2006).

A crise do petróleo na década de 70 foi o impulso que faltava para a Sasol se firmar com a síntese de FT, aumentando a capacidade produtiva e sendo inclusive totalmente privatizada em 1996. Com o passar dos anos, foram feitas descobertas de reservas de Gás Natural na África do Sul, criando-se então a Mossgas, atual Petro SA, que utilizou este gás como matéria-prima para a obtenção de hidrocarbonetos líquidos.

Para Gomes et al (2006), foi assim que a Sasol ampliou fortemente suas áreas e mercado de atuação, passando a ser licenciadora de tecnologia para obtenção de derivados líquidos a partir do Gás Natural, aproveitando todo o seu conhecimento na área de conversão química do carvão.

A exceção da Sasol na África do Sul, a falta de viabilidade econômica da síntese FT fez com que governos e empresas privadas deixassem de pesquisar a produção de combustíveis sintéticos a partir do final da década de 50, mas com a crise do petróleo na década de 70, esse cenário começou a mudar, na medida em que aumentaram as preocupações com a elevada dependência da importação. No início da década de 80, empresas privadas iniciaram um movimento para pesquisar mais a respeito do processo de FT, sendo que alguns fatores contribuíram para este interesse, como a adoção de normas ambientais cada vez mais rígidas nos principais mercados consumidores de derivados de petróleo, bem como pelo aumento de reservas de Gás Natural consideradas remotas, que passam a se tornar economicamente viáveis com a tecnologia de combustíveis sintéticos, e que a qualidade dos produtos obtidos via síntese de FT é superior aos tradicionais derivados do petróleo (Gomes et al, 2006).

2.1 - Produtos

A nafta obtida pela síntese de FT é altamente parafínica e isenta de enxofre, o que torna este produto muito atraente como matéria-prima para a produção de olefinas, na indústria petroquímica, por este motivo, é comum nomearem este produto obtido pela rota GTL como nafta petroquímica. Sua densidade é comparável aquela obtida pelos processos convencionais, assim como a faixa de destilação ASTM D86. A Tabela 2.1 exemplifica algumas das propriedades da nafta GTL.

Já a Tabela 2.2 apresenta as propriedades físicas e químicas do diesel GTL, e em Gomes et al (2006) encontramos alguns comentários sobre este produto. A menor densidade do diesel GTL é explicada por sua composição, que consiste praticamente de compostos parafínicos, enquanto os aromáticos representam menos de 1% (em massa). Como consequência, o combustível GTL possui um poder calorífico, em base mássica (MJ/kg), de 4 a 5% maior que o diesel convencional. Porém, devido à sua baixa

densidade, o teor energético em base volumétrica, que é a base para venda do produto, é menor.

Tabela 2.1 – Principais Propriedades da Nafta Petroquímica GTL (Gomes et al, 2006)

Propriedade	Método	Nafta GTL	Nafta Comum
Densidade a 15°C (kg/L)	ASTM D4052	0,67 – 0,68	0,665
Densidade API		76,6 – 79,7	81,3
Enxofre Total (mg/kg)		Não detectado	220
Composição	Método	% (m/m)	
Compostos Parafínicos	Análise por Cromatografia	98	91,5
Razão normal / iso-parafínicos		1,3:1	Não Disponível
Aromáticos	Gasosa	Não detectado	1,1
Oxigenados		Não detectado	0,005
Destilação	Método	Temperatura (°C)	
Ponto Inicial de Ebulição	ASTM D86	30	36
10% vaporizado		55	45
50% vaporizado		110	55
90% vaporizado		136	98
Ponto Final de Ebulição		150 – 185	145

O número de cetano e o ponto de entupimento são influenciados pela elevada quantidade de compostos parafínicos encontrados no diesel GTL. O número de cetano é impactado positivamente, apresentando valores bastante elevados, na ordem de 75. Porém, as propriedades de escoamento a frio são impactadas negativamente, como o caso do ponto de entupimento e o ponto de fluidez (Gomes et al, 2006),

O baixo teor de enxofre do diesel GTL pode ser explicado pela baixa concentração de enxofre encontrada no gás natural, matéria-prima para o processo GTL. Além disso, durante a etapa de geração de gás de síntese, esta pouca quantidade de enxofre é removida, uma vez que esse elemento é um veneno ao catalisador empregado na síntese de FT.

De acordo com o trabalho de Gomes et al (2006), os lubrificantes são normalmente classificados conforme o método de obtenção e as respectivas características físico-químicas, existindo, para tanto, diferentes grupos. Os lubrificantes são ditos do Grupo I quando obtidos a partir da rota solvente; do Grupo II quando

obtidos a partir de hidrorrefino; do Grupo III quando são obtidos por isomerização de parafinas ou pela rota GTL (lubrificante sintético); os do Grupo IV, V e VI são específicos para as poli- α -olefinas, ésteres (e outros) e *poli internal olefins*.

Tabela 2.2 – Principais Propriedades do Diesel GTL (Gomes et al,2006)

Propriedade	Método	Diesel GTL	Diesel Comum
Densidade a 15°C (kg/L)	ASTM D4052	0,78	0,82 – 0,86
Viscosidade Cinemática @ 40°C (cSt)	ASTM D445	2	2 – 4
Flash Point (°C)	ASTM D92	> 55	> 55
Número de Cetano	ASTM D613	> 75	45 – 55
Enxofre Total (mg/kg)	ASTM D5453	< 5	< 10 a > 350
Aromáticos (% vol)	IP 391/95	1	25 – 40
Policiclo Aromáticos	IP 391/95	Nulo	3 – 7
Destilação	Método	Temperatura (°C)	
Ponto Inicial de Ebulição		155 – 180	170 - 215
10% vaporizado		190 – 220	205 – 255
50% vaporizado	ASTM D86	245 – 290	240 – 300
90% vaporizado		315 – 350	290 – 360
95% vaporizado		< 360	320 – 380
Ponto Final de Ebulição		340 – 375	340 – 400

Os lubrificantes do Grupo III apresentam propriedades físico-químicas superiores aos demais grupos e por isso possuem maior valor agregado. Como exemplos, podem ser citados baixa volatilidade, baixo ponto de fluidez, alto ponto de fulgor, elevado índice de viscosidade, excelente estabilidade térmica e boa resposta ao uso de aditivos. A Tabela 2.3 mostra uma comparação das principais propriedades dos lubrificantes dos diferentes grupos. Os lubrificantes obtidos pela rota GTL também competem no mercado de poli- α -olefinas.

Tabela 2.3 – Propriedades de lubrificantes de diferentes grupos (Gomes et al, 2006)

Propriedade	Grupo I	Grupo II	Grupo III		Grupo IV
			Isomerização	GTL	(PAO)
Densidade 20/4°C	0,8670	0,8526	0,8151	0,8180	0,8150
Viscosidade @ 100°C (cSt)	5,050	4,826	3,963	4,500	4,600
Índice de Viscosidade	101	102	146	144	132
Ponto de Fluidez (°C)	-6	-18	-18	-39	-57
Volatilidade Noack (%m)	16,1	13,8	12,9	8,0	13,0
Saturados (%m)	83	99	~ 100	~ 100	~ 100

2.2 - Processos

O processo GTL como um todo tem 3 principais fases, conforme descrito na Figura 2.1. A primeira etapa consiste na geração do gás de síntese, uma mistura de monóxido de carbono (CO) e hidrogênio (H₂). Na prática, a verdadeira matéria-prima de todo o processo é o gás de síntese, independente da fonte de carbono usado para produzi-lo, como carvão, Gás Natural e biomassa.

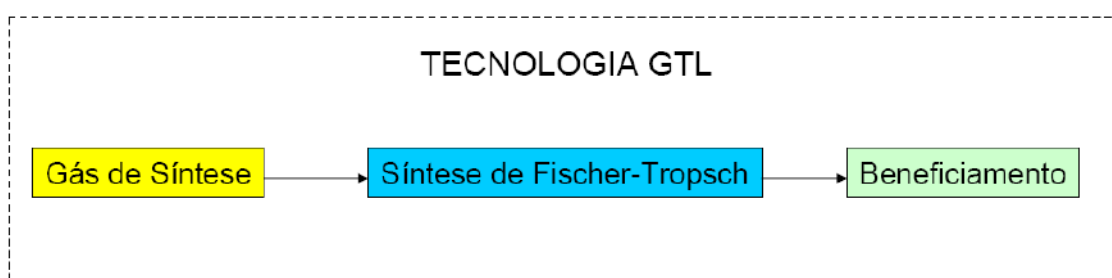


Figura 2.1 – Principais fases do processos GTL (Elaboração Própria)

Depois que o gás de síntese é formado e tem suas condições ajustadas para ser usado na reação principal, temos a etapa da Síntese de Fischer-Tropsch, em que as moléculas de CO e H₂ reagem sobre um catalisador, normalmente de ferro ou cobalto, numa reação química que poderia ser considerada como de polimerização, visto que de moléculas com apenas um átomo de carbono (C₁) pode-se obter parafinas sólidas com mais de 40 átomos de carbono (C₄₀⁺).

Para finalizar os produtos passam pela etapa de Beneficiamento, que fornece tratamento a estes produtos aumentando assim seu valor agregado.

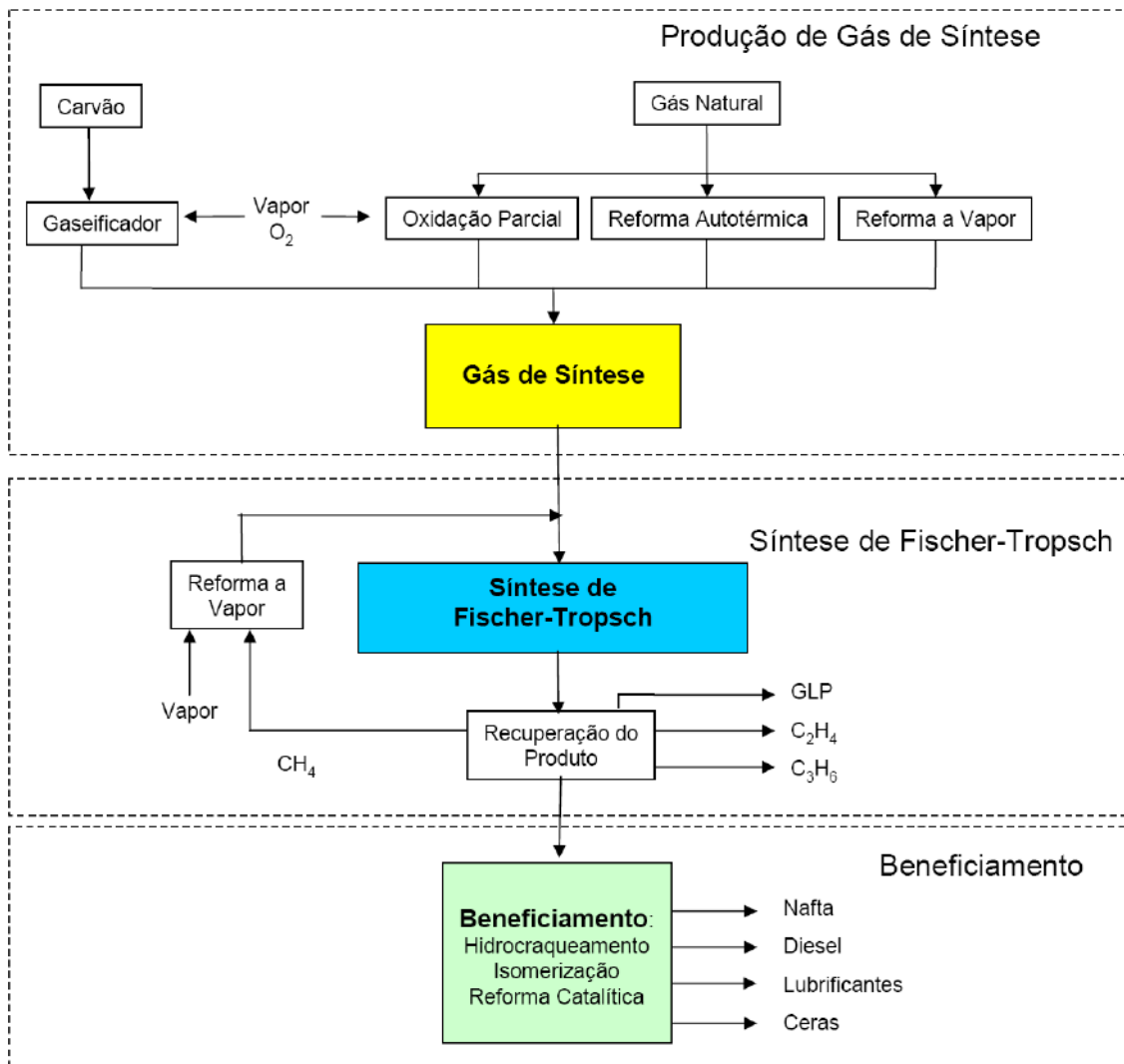


Figura 2.2 – Algumas etapas envolvidas nas principais fases do processo GTL
(Elaboração Própria)

Estas três principais fases do processo GTL: Gás de Síntese, Síntese de Fischer-Tropsch e Beneficiamento, possuem algumas de suas etapas exploradas na Figura 2.2, sendo que nos próximos tópicos cada uma destas fases será melhor discutida

2.3 - Geração de Gás de Síntese

A geração do gás de síntese é a primeira etapa da obtenção de combustíveis líquidos a partir do GN. Neste processo, a corrente de GN que é basicamente metano, é transformada numa corrente de monóxido de carbono (CO) e hidrogênio (H₂), conforme as reações mais abaixo.

A etapa de geração de gás de síntese tem uma importância muito grande quando se pesa o investimento financeiro de uma planta GTL, isto porque cerca de 50-60% do custo de produção e 51 % do custo de instalação são gastos com esta fase do processo (Gomes et al, 2006).

Atualmente, existem muitos processos para a geração do gás de síntese, entretanto apenas quatro são considerados comerciais. São eles: Reforma a Vapor do Metano (Steam Methane Reforming - SMR), Oxidação Parcial (Partial Oxidation - POX), Reforma Autotérmica (Autothermal Reforming - ATR) e Reforma Combinada. Cada processo apresenta vantagens e desvantagens em relação aos demais e, por isso, a escolha da melhor tecnologia é feita sempre levando em consideração fatores como: custo do gás natural, disponibilidade de água, energia, capacidade e localização da planta.

Outras tecnologias também poderão ser utilizadas como a Reforma com Gás Aquecido (Gas-Heated Reforming - GHR), que já está disponível para ser operacionalizada, e a Oxidação Parcial Catalítica (Catalytic Partial Oxidation – CPO) e Reforma com Membrana Cerâmica (Ceramic Membrane Reforming - CMR), que ainda estão em fase de desenvolvimento. Estas tecnologias possuem um grande potencial para dominarem o mercado futuro das plantas de geração de gás de síntese, pois foram desenvolvidas com o objetivo exclusivo de propiciar a redução nos custos de operação e de capital, seja através do aumento da eficiência energética, da redução do consumo de insumos ou da obtenção de produtos com maior pureza, eliminando etapas subsequentes no processo (Gomes et al, 2006).

A seguir é apresentada uma breve descrição de cada uma das principais tecnologias comerciais de geração do gás de síntese.

A Reforma a Vapor é o processo mais usual para conversão do gás natural a gás de síntese. É a tecnologia que domina os processos de conversão de gás natural a hidrogênio e gás de síntese para amônia, metanol e outros petroquímicos (Souza, 2004).

Este processo consiste da reação provocada pela mistura reacional de vapor d'água e GN (metano), formando H₂ e CO, gás de síntese. As reações envolvidas são:



Segundo Souza (2004), a primeira reação é a de reforma, que é bastante endotérmica sendo favorecida pela temperatura elevada e a pressão reduzida. A segunda reação é de deslocamento de gás de água ou reação de Shift. É levemente exotérmica e favorecida pela temperatura baixa, mas insensível à pressão. As duas reações ocorrem simultaneamente no reator de reforma em temperaturas que variam entre 700°C e 950°C e pressão parcial de vapor próxima a 30bar.

A reação de oxidação parcial do metano é a chamada "reação dos sonhos" para o processo GTL, pois produz um gás de síntese com razão $\text{H}_2/\text{CO} = 2$ ideal para os catalisadores FT atuais (Souza, 2004).



Quando a reação se passa sem o uso de catalisadores, garantir que apenas a oxidação parcial irá ocorrer é mais difícil. Os produtos da oxidação parcial são intermediários da reação de oxidação total e as condições de operação devem ser extremamente bem controladas para que não se obtenha somente CO_2 e H_2O , conforme mostra a reação 2.4. Neste caso as reações de oxidação total sempre aparecem mesmo em condições de operação controladas e a razão H_2/CO deixa de ser 2 e passa a ser próxima à 1.6 (Souza, 2004).



Na oxidação parcial as temperaturas de operação são muito altas ficando entre 1200 e 1400°C para garantir a conversão e reduzir a formação de fuligem. Neste processo sempre haverá formação de fuligem e uma unidade para retirada da mesma deverá ser utilizada.

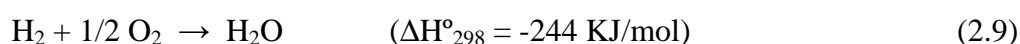
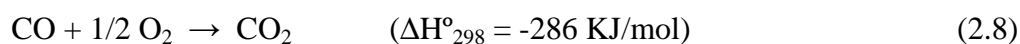
Uma possibilidade para aumentar a eficiência desta reação de oxidação parcial, é o uso de catalisadores, que aumentariam a seletividade para geração dos produtos alvo. Esta reação sobre leito catalítico é conhecida como oxidação parcial catalítica (Catalytic Partial Oxidation - CPO).

Segundo o trabalho de Souza (2004), a solução para o dilema da razão ideal H₂/CO para o processo FT é usar juntas as tecnologias de SMR e POX. O SMR gera um gás de síntese com razão superior a adequada enquanto que no POX esta mesma razão é inferior.

Esta junção chama-se reforma autotérmica (ATR) que combina SMR e POX em um mesmo reator. É chamado autotérmico por que o calor gerado pela reação de combustão (oxidação parcial) é utilizado pela reação de reforma a vapor em contraste com os reatores convencionais que utilizam combustão externa de combustíveis para gerar calor. As reações envolvidas são:



Existem outras reações que também ocorrem no reator e são impossíveis de serem evitadas:



O processo que combina a reforma a vapor com a reforma autotérmica, permitindo um melhor aproveitamento energético do que o obtido com os processos individuais é a reforma combinada. Neste caso o reator possui duas seções. A reforma a vapor ocorre na zona superior do reator, na presença de catalisador. Os efluentes desta seção, o gás de síntese e o metano não convertido, reagem com o oxigênio na zona inferior do reator (reator secundário). Os reatores secundários são ligeiramente diferentes dos reatores autotérmicos comuns, em função das cargas possuem composições bem diferentes (Gomes et al, 2006).

As reações que ocorrem no reator primário de reforma a vapor estão representadas abaixo.



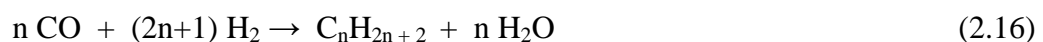
No reator secundário, onde se processa a Reforma Autotérmica, ocorrem as reações abaixo.



2.4 - Síntese Fischer-Tropsch

Dentro de todo o processo GTL, a síntese de Fischer-Tropsch é considerada o coração da tecnologia. Através desta, o gás de síntese é convertido em uma mistura de hidrocarbonetos composta principalmente por hidrocarbonetos parafínicos saturados e α -olefinas com diferentes tamanhos de cadeia, podendo gerar inclusive alcoóis. Esta reação catalisada por metais é altamente exotérmica.

Em linhas gerais a síntese de FT poderia ser descrita pelas duas equações abaixo. A primeira corresponde à formação de parafinas saturadas e a segunda olefinas, sendo que a única diferença entre elas é uma molécula de hidrogênio. Apesar de não estarem representadas abaixo, existem outras reações acontecendo, como a reação de Shift (reação 2.15) e a formação de álcoois.



As principais reações que ocorrem na síntese de FT variam de acordo com o catalisador empregado, sendo que os mais utilizados comercialmente são os catalisadores à base de ferro ou cobalto.

Catalisadores à base de ferro, cujo custo é relativamente baixo, possuem como característica a reação de deslocamento de gás d'água (*water gas shift*). Esta alta atividade em relação à reação de deslocamento de gás d'água resulta em uma baixa eficiência de carbono para o processo Gas to Liquids, justificada por uma maior perda de carbono na forma de CO₂. À elevada temperatura (~ 340 °C), catalisadores à base de ferro são seletivos para a formação de olefinas de baixa massa molar, com baixa seletividade para formação de metano. A aplicação desses catalisadores para a produção de parafinas de alta massa molar é limitada em função da tendência para formação de carbono elementar, o que causa desativação do catalisador (Gomes et al, 2006).

Nos catalisadores à base de cobalto, de maior custo, a atividade da reação de deslocamento de gás d'água é baixa, o que faz com que a água seja o principal produto oxigenado da reação. Quando comparados a catalisadores à base de ferro, os catalisadores à base de cobalto possuem maior seletividade para formação de hidrocarbonetos pesados, pois as olefinas tendem a ser re-adsorvidas no catalisador dando continuidade ao processo de crescimento de cadeia (Gomes et al, 2006).

Por se tratar de uma reação extremamente exotérmica, a remoção de calor do reator é um parâmetro crítico na síntese de FT, que deve ser resolvido. Por isso, alguns dos principais tipos de reatores desenvolvidos a partir da década de 50 para a síntese de FT estão representados abaixo e na Figura 2.3.

1. Reator de leito fixo multi-tubular (Multi Tubular Trickle Bed Reactor) (Figura 2.3a);
2. Reator de leito fluidizado circulante (Circulating Fluidized Bed Reactor) (Figura 2.3b);
3. Reator de leito fluidizado (Fluidized Bed Reactor) (Figura 2.3c);
4. Reator de leito fluidizado trifásico ou reator de leito de lama (Slurry Bubble Column Reactor) (Figura 2.3d).

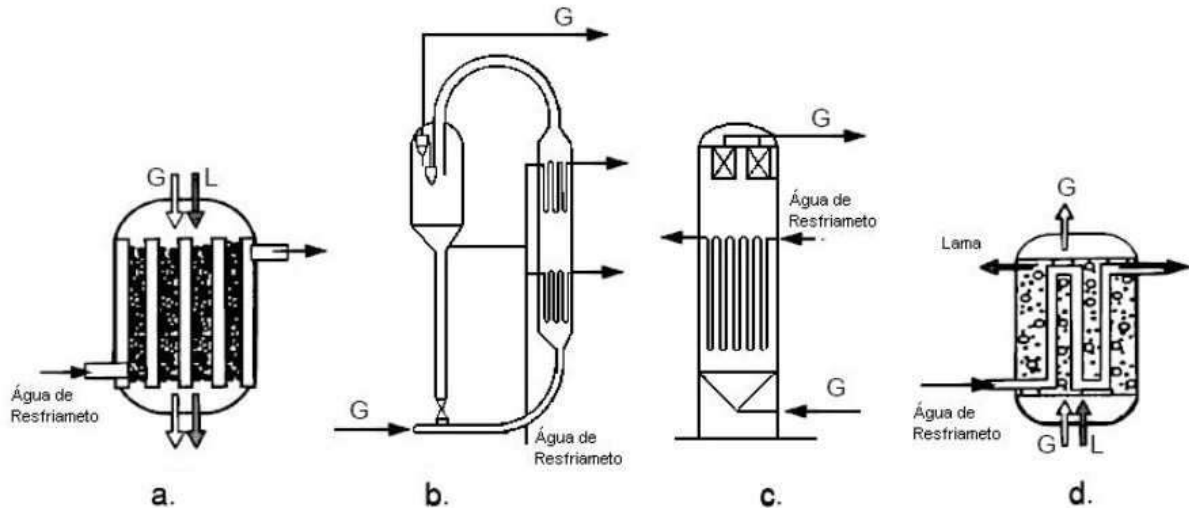


Figura 2.3 – Reatores para a síntese de Fischer-Tropsch: a. Reator de leito fixo multi-tubular; b. Reator de leito fluidizado circulante (CFB); c. Reator de leito fluidizado (FFB); d. Reator de leito de lama (Gomes et al, 2006)

Obviamente os diferentes projetos básicos para cada tipo de reator mostram características e limitações no que concerne aos requisitos básicos da reação, tais como: capacidade de transferência de calor, perda de carga, tempo de residência, regeneração ou troca de catalisador e comportamento do catalisador. As diversas faixas possíveis de produtos gerados também impõem limitações para a escolha do reator.

Os reatores de leito fixo multi-tubulares (Figura 2.3a) são normalmente utilizados para a produção de parafinas lineares de alta massa molar. O calor liberado na reação FT é removido pela água que circula ao redor dos tubos reatores, com geração de vapor. Sendo o principal objetivo a produção de parafinas, estes reatores operam a temperaturas relativamente baixas (~ 225°C). Em temperaturas mais elevadas (acima de 280°C), além de ocorrer uma redução na seletividade para a produção da parafina, é possível ocorrer a deposição de fuligem sobre as partículas do catalisador, que pode levar ao entupimento do reator (*plugging*) (Gomes et al, 2006).

Os reatores de leito fluidizado circulante (CFB) (Figura 2.3b) são utilizados para a produção de olefinas e óleos de baixa massa molar. A produção de óleos pesados e parafinas devem ser evitadas, pois um excessivo molhamento do catalisador pode resultar na aglomeração de partículas com conseqüente perda de fluidização do leito. A remoção do calor gerado na reação ocorre parcialmente em trocadores de calor e parcialmente pela corrente de gases efluentes do reator.

Os reatores do tipo leito fluidizado (FFB) (Figura 2.3c) foram desenvolvidos posteriormente ao CFB e, na época, estimava-se que seu custo seria 50% do custo de um reator CFB de capacidade equivalente. Os FFB's são reatores mais simples e de menor porte. Possuem menor perda de carga e por isso seus custos de operação também são significativamente menores em função do custo de compressão do gás (menor ΔP necessário na compressão). Estes reatores demonstraram desempenho superior aos reatores CFB's, com maior conversão e menor perda de catalisador.

Finalmente, os reatores de leito de lama (Figura 2.3d) são similares aos reatores do tipo FFB, exceto pelo catalisador estar suspenso em uma fase líquida, como parafina fundida resultante da síntese de F-T. Os primeiros estudos mostraram que, para elevadas temperaturas (~ 320 °C), o reator de leito de lama possui menor conversão do que o sistema FFB. Além disto, nessas condições, a parafina é hidrocraqueada resultando em uma perda da fase líquida média. Portanto, o reator de lama não compete com os sistemas FFB / CFB e foi, então, concebido como uma alternativa para o reator multi-tubular de leito fixo para produção de parafinas a baixas temperaturas (Gomes et al, 2006).

O mecanismo que governa a síntese de Fischer-Tropsch ainda não está bem definido e por isso existem alguns modelos que tentam explicar o que ocorre dentro do reator de FT. Segundo Lann (1999), Kraum (1999) e Djik (2001) os principais mecanismos são os de *carbide*, *hydroxycarbene*, inserção de CO, paralelo e alquenil. Entretanto, uma abordagem muito utilizada é a de um modelo de distribuição de produtos, neste caso a distribuição de Anderson-Schulz-Flory (ASF), que será discutida mais à frente.

2.5 - Beneficiamento dos Produtos

Depois das fases de geração de gás de síntese e síntese de FT, os produtos podem sofrer diversos tipos de acabamento como hidrocraqueamento, hidrotratamento, isomerização, hidroisomerização, alquilação, reforma catalítica e pirólise.

No hidrocraqueamento, os hidrocarbonetos de cadeia longa são transformados em moléculas menores, através de um craqueamento catalítico em presença de hidrogênio. O objetivo principal é obter destilados médios para a produção de diesel.

Este processo pode ser de alta severidade (HCC) ou brando (MHC). Quando se deseja conversões acima de 50% para cargas com alto teor de contaminantes (enxofre, nitrogênio e aromáticos), utiliza-se o HCC. Para o caso de cargas provenientes da rota GTL, que apresentam alta pureza, utiliza-se o MHC, onde algumas condições operacionais são moderadas. Por exemplo, a pressão parcial de hidrogênio no MHC varia de 5000 a 9000 kPa (50-90 bar), enquanto que no HCC varia de 7000 a 18 000 kPa (70-180 bar) (Gomes et al, 2006).

O hidrotratamento tem como objetivo remover contaminantes, tais como compostos oxigenados, nitrogenados, sulfurados, aromáticos e contendo metais, que podem, entre outras coisas, contaminar os catalisadores utilizados em outros processos. Além disto, é utilizado para saturar mono e di-olefinas e, assim, reduzir a formação de goma nos combustíveis. É um processo que também se passa em presença de hidrogênio, mas em que não ocorre o craqueamento das moléculas (Gomes et al, 2006).

A isomerização é utilizada para aumentar a octanagem da gasolina através da transformação de compostos parafínicos, como butano e pentano, em isoparafínicos. As reações ocorrem na presença de um catalisador que, usualmente, consiste em platina sobre algum material de suporte.

Na hidroisomerização ocorre o craqueamento e a isomerização das moléculas. Esta última reação melhora as propriedades de escoamento do produto obtido. Empresas como a Shell e a Chevron Lummus Global LLC detêm esta tecnologia e o catalisador adequado apresenta uma pequena quantidade de platina e é suportado em sílica-alumina (Gomes et al, 2006).

A alquilação é utilizada para produção de gasolina de alta octanagem através da reação entre o isobutano e uma olefina. A olefina pode variar de três a cinco átomos de carbono, mas a que produzirá a gasolina de maior octanagem é o buteno, gerando assim o iso-octano. Este processo pode ser feito de forma térmica ou catalítica, utilizando ácido sulfúrico ou ácido fluorídrico como catalisadores.

Na reforma catalítica ocorre a transformação de compostos parafínicos lineares e naftênicos em compostos aromáticos e isoparafínicos. Este processo pode ser direcionado para dois objetivos distintos: produzir gasolina de alto número de octano ou formar produtos ricos em hidrocarbonetos aromáticos mais nobres, como benzeno, tolueno e xileno. Estes compostos são utilizados como solventes orgânicos ou ainda como matéria-prima para a indústria petroquímica.

A pirólise é realizada pela aplicação de calor e pressão em presença de vapor d'água, gerando moléculas menores do que a carga. Uma de suas aplicações é a geração de eteno (Gomes et al, 2006).

3 - Modelagem do Processo GTL

Para a simulação da síntese de Fischer-Tropsch, foi escolhida a distribuição de produtos de Anderson-Schulz-Flory (ASF), que é comumente encontrada em diversos trabalhos da literatura. Esta equação está descrita abaixo:

$$m_n = (1 - \alpha)\alpha^{n-1}, \quad \frac{w_n}{n} = \frac{(1 - \alpha)^2}{\alpha} \alpha^n \quad (3.1)$$

O fator de probabilidade de crescimento da cadeia é definido por α , que tem em n o número de carbonos da cadeia. A fração molar é representada por m_n , enquanto w_n define a fração mássica do produto de cadeia n .

Segundo a SHELL (2008a), a reação de síntese de Fischer-Tropsch pode ser modelada com o crescimento da cadeia da reação do CO e H₂ na superfície de um catalisador heterogêneo. A distribuição do número de carbonos do óleo sintético cru segue a distribuição de Anderson-Schulz-Flory (ASF)”, mostrando assim a importância deste tipo de modelagem. Uma representação gráfica da equação acima é obtida na Figura 3.1.

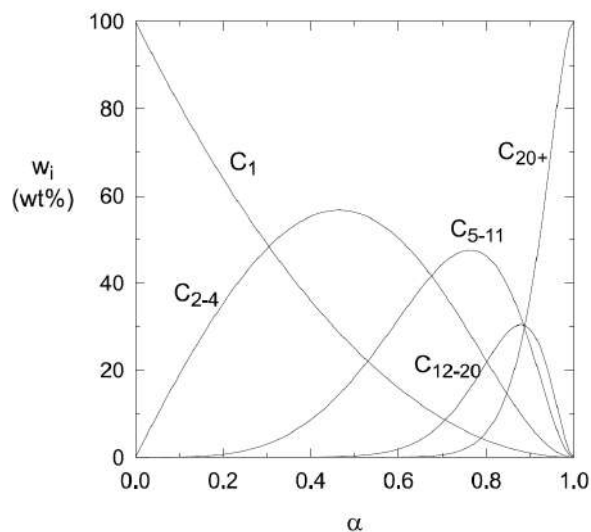


Figura 3.1 – Distribuição de ASF (Lann, 1999)

Com base na equação 3.1, diversos valores de w_n e α foram listados, estão apresentados Figura 3.2.

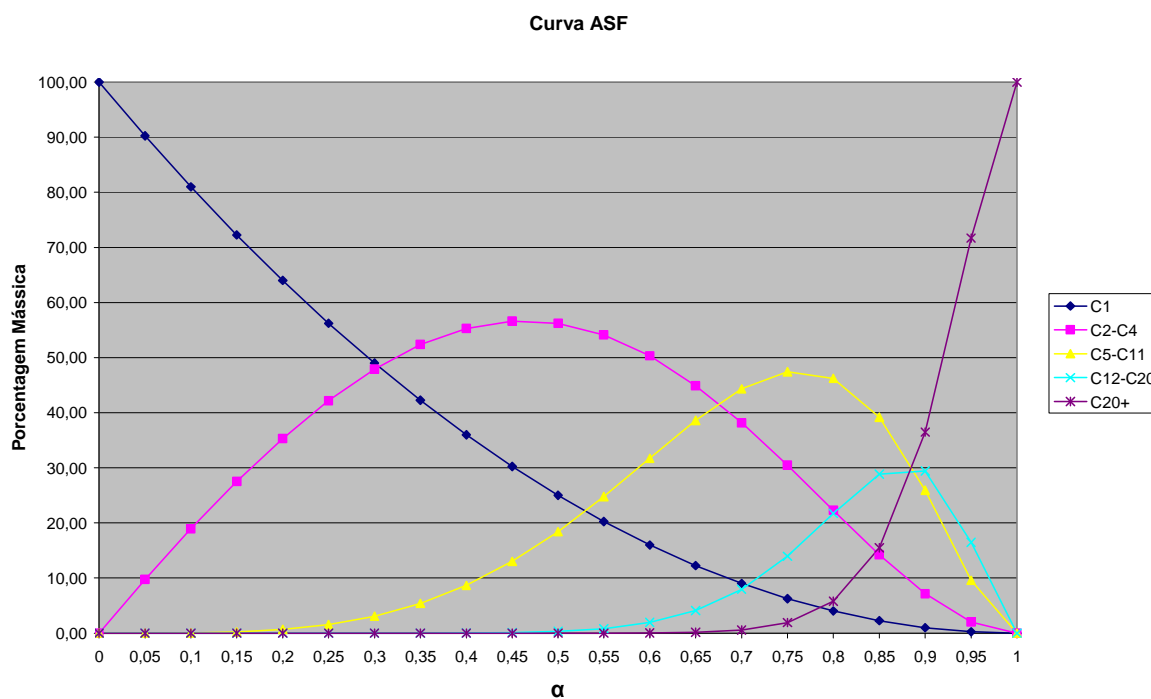


Figura 3.2 – Distribuição de ASF (Elaboração Própria)

Comparando a Figura 3.1 e a Figura 3.2, fica validada a equação 3.1

3.1 - Distribuição de Produtos da Síntese FT

A reação de FT permite a geração de uma vasta gama de produtos, desde metano até parafinas de elevada massa molar. Portanto, deve-se selecionar as condições de operação que otimizem o rendimento do produto desejado.

Os dados de importação de derivados de petróleo (ANP, 2008c) são mostrados na Tabela 3.1, mostrando que o diesel é o produto que teve maior volume de importação desde o ano de 2000. Nos anos de 2004 a 2006 houve um predomínio da importação de Nafta petroquímica e, a partir de 2007, o diesel recuperou esta hegemonia e, ao que tudo indica, ao final de 2008 continuará à frente. Por este fato, no intuito de assinalar uma

possível substituição das importações de diesel no Brasil, este derivado foi escolhido como o produto a ser maximizado na síntese de FT neste trabalho. Obviamente, o modelo também pode ser ajustado para maximizar outros produtos como Olefinas Leves, Nafta Petroquímica, Óleos lubrificantes dentre outros.

Tabela 3.3.1 – Dados de Importação de Derivados do Petróleo (Elaboração Própria)

Produto	Ano								
	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007	2008
GLP	32.057.829	24.222.683	21.104.848	12.830.865	11.825.725	5.960.199	9.972.298	11.287.462	9.817.656
Gasolina	382.027	211	1.032.084	1.142.717	348.211	447.599	177.671	62.976	875
Nafta PTQ	23.772.401	20.800.759	20.460.625	20.102.887	20.349.311	26.889.968	26.908.864	26.271.006	15.447.476
Diesel	36.486.460	41.420.368	40.065.553	24.016.818	16.949.196	14.915.091	22.297.889	32.074.357	29.379.611
Lubrificante	955.465	1.344.934	1.542.101	1.415.227	1.701.566	2.138.581	1.823.302	2.739.226	2.421.044
Parafina	61.963	223.482	124.992	117.980	58.431	33.378	75.621	134.867	108.363

Nota1: Valores em barris de petróleo
 Nota2: Dados de 2008 até o mês de setembro

Outro fato analisado durante a escolha em maximizar diesel e que contribui para os valores apresentados na Tabela 3.3.1, é que, nas refinarias da PETROBRAS, a geração de gasolina nas últimas décadas foi priorizada em relação ao diesel. Adicionalmente, nosso país é essencialmente rodoviário (consumo de diesel via caminhões e ônibus).

3.2 - Premissas do Estudo

Para a execução da simulação, faz-se necessário a adoção de algumas premissas, devido às possibilidades de uso de diferentes tipos de catalisadores e reatores. O próprio escopo da simulação também deve estar bem definido, pois como foi visto no capítulo anterior, a síntese de Fischer-Tropsch pode ser dividida em três grandes grupos, a geração do gás de síntese, a reação propriamente dita e uma etapa final de beneficiamento dos produtos.

A tecnologia escolhida para o reator Fischer-Tropsch neste trabalho foi a de leito fixo. Existem algumas unidades no mundo operando com outras tecnologias, como o reator em leito de lama e fluidizado, mas em função de diversos artigos disponíveis na literatura e apesar da dificuldade na remoção do calor gerado em função da elevada

exotermicidade da reação, os reatores em leito fixo tendem a apresentar um projeto final mais simples.

Em relação ao catalisador, segundo Lann (1999), o baseado em ferro gera mais olefinas e também CO_2 , portanto haveria mais uma substância a ser avaliada. Já o catalisador de cobalto prioriza a formação de n-parafinas e de acordo com Farias (2007) é o mais indicado para maximizar diesel, sendo, portanto escolhido. Como o catalisador de cobalto gera muito pouco CO_2 e álcoois, estes compostos não foram considerados.

Outro parâmetro importante é a conversão da reação, que é definida, entre outras coisas pelo catalisador. O'Brien et al (1997) assinalou uma conversão de 90% em CO, valor que também será adotado neste trabalho. É importante ter em mente que o valor da conversão em CO não afeta a distribuição de produtos, que é dada pela equação 3.1, mas sim a quantidade de produtos gerada, ou seja, quanto maior a conversão, mais CO é consumido e, portanto maior será o impacto na geração de gás de síntese.

Segundo Lann (1999), alguns desvios para os compostos leves, principalmente metano e etano, são encontrados quando se compara a distribuição de ASF com resultados experimentais. Contudo, como o objetivo é maximizar diesel, a fração de leves é pequena, e estes erros não serão considerados. Ressalta-se que a abordagem desenvolvida neste trabalho permite a utilização de outros valores para a conversão em CO ou em H_2 .

Como base de simulação, considera-se a geração de 100 barris por dia (bpd) de diesel visando-se avaliar o consumo de gás de síntese para os diversos α avaliados. Adicionalmente, como a equação 3.1 só relaciona α como o tamanho da cadeia, sem levar em conta a proporção de olefinas e parafinas no óleo sintético, para cada n , foi utilizado o gráfico de Yakobson (2001), fonte Rentech, empresa americana de tecnologia e desenvolvedora da tecnologia GTL. A Figura 3.3, mostra a relação de olefinas/parafinas para diversos valores de número de átomos de carbono no hidrocarboneto (n).

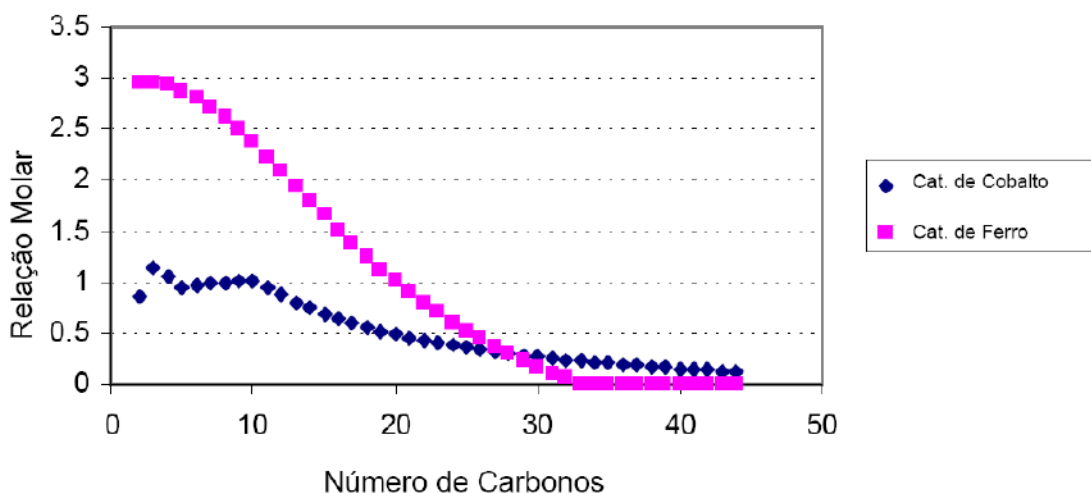


Figura 3.3 – Relação molar Olefina/Parafina para a síntese de FT (Yakobson,2001)

Com a figura acima, foram coletados os dados que permitiram calcular a distribuição entre olefinas e parafinas para cada alfa adotado. Este é um parâmetro importante, pois informa para cada n o quanto de olefina e parafina foi gerado. O gráfico da Rentech apresenta valores de hidrocarbonetos com até 20 átomos de carbono na cadeia, entretanto pode ser observado que o eixo “x” possibilita um alcance ainda maior no tamanho da cadeia. Para simplificação da simulação, todos os hidrocarbonetos (parafinas e olefinas) de C1 até C20 serão monitorados, e todos os demais (C20+), serão aproximados pelo triacontano (C30).

Para a conversão dos produtos de base mássica para base volumétrica, foi adotada a Tabela 3.2.

Tabela 3.2 – Densidade adotada para os produtos (Valle, 2002)

	Densidade Adotada
	kg/m ³
GLP	550,0
Nafta	710,0
Diesel	770,0
Pesados	900,0

3.3 - Simulação de Síntese Fischer Tropsch

Para a simulação da síntese de Fischer-Tropsch, foi escolhido o simulador HYSYS, disponível para uso acadêmico na Escola de Química da UFRJ. Utilizou-se o modelo termodinâmico de Soave-Redlich-Kwong (SRK), adequado para misturas de hidrocarbonetos. Na definição do elenco de substâncias químicas envolvidas no processo, adotou-se a premissa de não gerar CO₂ e alcoóis devido à utilização de catalisador de cobalto. Adicionalmente, aproximou-se os hidrocarbonetos com mais de 20 átomos de carbono pelo triacontano (C₃₀). As reações de formação de cada hidrocarboneto a partir do gás de síntese (CO+H₂) foram incluídas no modelo, um total de 21 reações de formação de parafinas (C₁ até C₂₀ mais o C₃₀) e 20 reações de formação de olefinas (C₂ até C₂₀ mais o C₃₀).

Empregou-se o reator de conversão estequiométrico na simulação, e esta conversão definida em 90% base CO. A conversão individual de cada reação é calculada de modo a atingir a conversão global de 90%, com produção de 100 bpd de diesel, permitindo calcular as quantidades geradas de cada reação individualmente, assim como a quantidade de CO e H₂ consumida e fornecida além da geração de água subproduto no efluente do reator. Adotou-se na especificação da corrente de gás de síntese, obtida a partir do Gás Natural, o trabalho de Choi et al (1996). Os autores apresentam um fluxograma para a geração de gás de síntese a partir do GN, e caracterizam como última etapa do processo a remoção de CO₂. Segundo Bellona (2002), a tecnologia convencional para esta etapa envolve o uso de aminas e no trabalho de Hee-Moon et al (1997) valores usuais para esta remoção com MEA vão de 30°C a 50°C. Assim, foi considerada uma corrente de gás de síntese a 40°C.

Dados da Wolkswagen (2008) mostram que a síntese de Fischer-Tropsch usualmente ocorre com temperaturas na faixa de 160°C a 350°C e pressão entre 1,0 e 30 bar. Ainda segundo a Wolkswagen (2008) e Gomes et al (2006), a temperatura ideal para formação de diesel e parafinas deve ser menor que 250°C.

De acordo com Lann (1999), uma condição usual para esta síntese com catalisador de cobalto em leito fixo é de 465K a 2,07MPa, e que o efeito de aumento da cadeia cresce com o aumento da pressão e a diminuição da temperatura. Isto posto, e de acordo com as margens apresentadas acima, a corrente de entrada no reator foi considerada a 220°C e 2450KPa.

Na saída do reator, considera-se uma variação de temperatura dentro da faixa de 220°C e 250°C, uma perda de carga entre 3,0 e 7,0 bar, para reatores tubulares de leito fixo, conforme dados de Jagger (1997). Considerando-se os 90% de conversão em CO

para a reação, optou-se por utilizar um reciclo para viabilizar a remoção de calor nos reatores Fischer-Tropsch (fator crítico quando se adota a tecnologia em leito fixo). Na temperatura de saída de 240°C, além do gás de síntese, alguns hidrocarbonetos estão no estado gasoso, assim como a água. Esta, por sua vez, em certa quantidade, é capaz de envenenar o catalisador FT, e por isso, deve ser evitado que o reciclo contenha teores elevados deste componente. Em função deste problema, foi considerado um resfriador do efluente do reator FT que poderá reter grande parte da água subproduto gerada.

O fluxograma concebido adota depois da seção de resfriamento, a separação em um vaso separador trifásico - fase gasosa, fase aquosa e fase oleosa (Gomes et al, 2006). Neste trabalho, não foram analisadas as etapas de beneficiamento e separação dos produtos acabados.

A corrente de maior relevância na análise de desempenho do processo é a corrente oleosa, com os principais produtos (nafta petroquímica, diesel e parafinas pesadas). Existem diversas possibilidades para beneficiamento desta corrente, conforme abordado no Capítulo 2 -. A corrente aquosa pode ser reaproveitada após tratamento, por exemplo, como fluido para remover calor do reator de Fischer-Tropsch através da geração de vapor ou em alguma outra etapa em que seja necessária troca térmica visando o resfriamento. A corrente de fase gasosa, mesmo com a diminuição de temperatura antes do separador trifásico, ainda apresenta algum teor de hidrocarboneto e, por isso, esta corrente poderá ser destinada para a geração de energia em função do seu elevado poder calorífico.

Para fechar os cálculos do reciclo, o HYSYS dispõe de um módulo chamado Recycle (RCY-1), que foi empregado para convergência do balanço material do reciclo. Esta corrente de reciclo, adicionada a corrente principal de gás de síntese, leva ao reator traços de água e uma certa quantidade de hidrocarbonetos gasosos. Por simplificação, a influência destes compostos que não são CO e H₂ não foram considerados. A pressão parcial de água que se não estiver baixa pode desativar o catalisador, não foi monitorada, face a concentração molar de água ser menor que 0,1%.

A Figura 3.4 apresenta o fluxograma para a Síntese de Fischer-Tropsch adotado com o intuito de maximizar diesel. A Tabela 3.3 mostra a nomenclatura utilizada para o fluxograma da Figura 3.4.

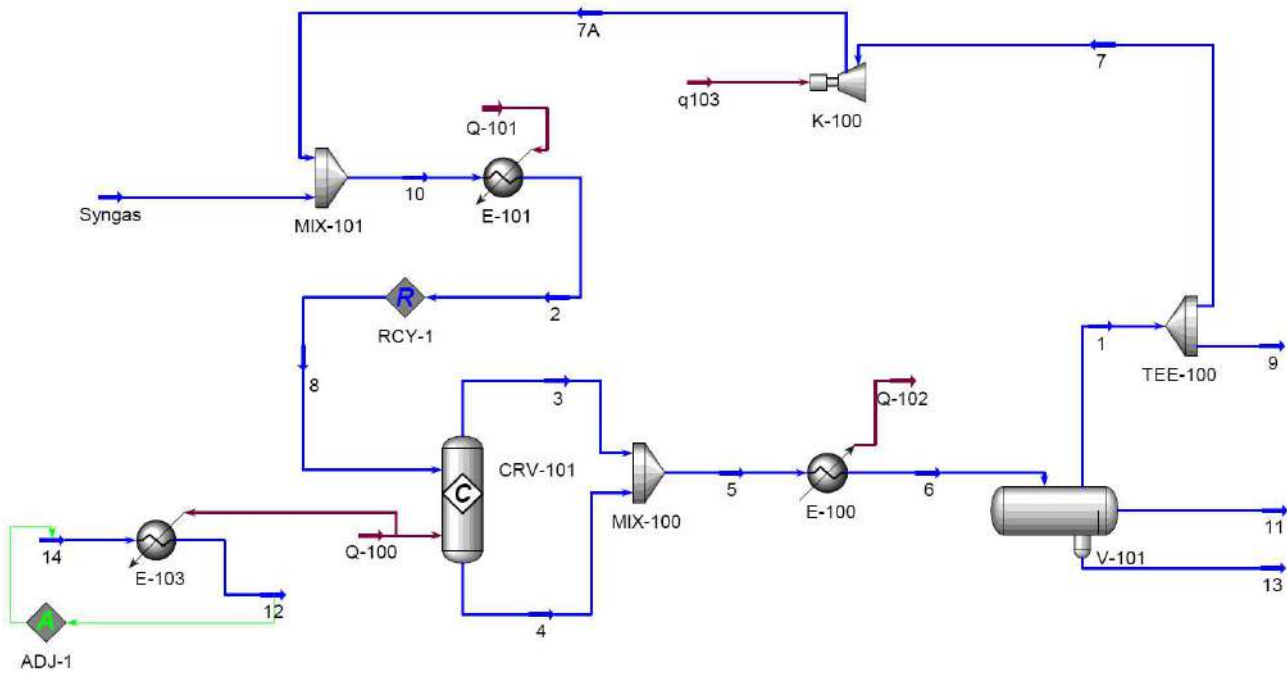


Figura 3.4 – Fluxograma da Síntese de FT para α 0,87 (Elaboração Própria)

Tabela 3.3 – Nomenclatura dos Equipamentos do Fluxograma de Síntese de FT

Equipamento	Nome
MIX-101	Misturador
E-101	Aquecedor
CRV-101	Reator de Conversão
MIX-100	Misturador
E-100	Resfriador
V-101	Separador Trifásico
TEE-100	Difusor
K-100	Compressor
E-103	Aquecedor

Independente da utilização de um reator em leito de lama ou leito fixo na síntese de FT, a remoção de calor sempre será realizada através do uso de água, portanto foi utilizado um mecanismo para calcular o quanto de água na temperatura de 100°C passa para a fase vapor com a quantidade de calor (Q-100) que deve ser removida do reator. A corrente 14, de água a 100°C, é aquecida (E-103) com o calor Q-100. O módulo ADJ-1 calcula qual a vazão da corrente 14, de modo que a fração vaporizada da corrente 12, seja sempre 1, ou seja, 100% de vapor d'água. É importante ressaltar que este bloco de

operações em nada interage ou interfere no resultado do reator FT, tratando-se apenas de um mecanismo para estimar o consumo de água de caldeira.

Numa planta industrial, 2 ou até 3 reatores leito fixo, em série, deveriam ser normalmente empregados para obter o valor total de conversão em CO. Por exemplo, na nova planta da SHELL no Qatar, a Pearl GTL, serão utilizados reatores HPS (*Heavy Paraffin Synthesis*) em série, conforme Figura 3.5, para realizar a síntese de Fischer-Tropsch, segundo informações da própria SHELL (2008b). Neste trabalho, para efeito de simulação, foi considerado apenas um reator para a reação de síntese FT, no qual em apenas um passo, é obtida a conversão total em CO, o que na prática só seria alcançado com 2 ou mais reatores em série.



Figura 3.5 – Reatores HPS na Pearl GTL (SHELL, 2008b)

Tomando-se como base 3 reatores, como na nova planta da SHELL, na saída de cada reator será necessário uma bateria de trocadores e um vaso separador trifásico, onde parte do óleo formado em cada estágio é separado e a água formada como subproduto é removida visando evitar o envenenamento dos leitos catalíticos.

4 - Resultados e Discussões

A seguir são apresentados e discutidos os resultados obtidos neste projeto, levando-se em consideração as premissas mencionadas no capítulo anterior.

4.1 - Melhor α para Maximizar Diesel

Utilizando a distribuição de ASF, é possível correlacionar a geração de diesel com o parâmetro de probabilidade de crescimento da cadeia α . Como pode ser observado na Figura 3.1 e na Figura 3.2, o pico de diesel está próximo de um α igual a 0,85. Dessa forma, para determinar o α que maximiza diesel, foi considerado o intervalo entre 0,80 e 0,95. O resultado está expresso na figura abaixo.

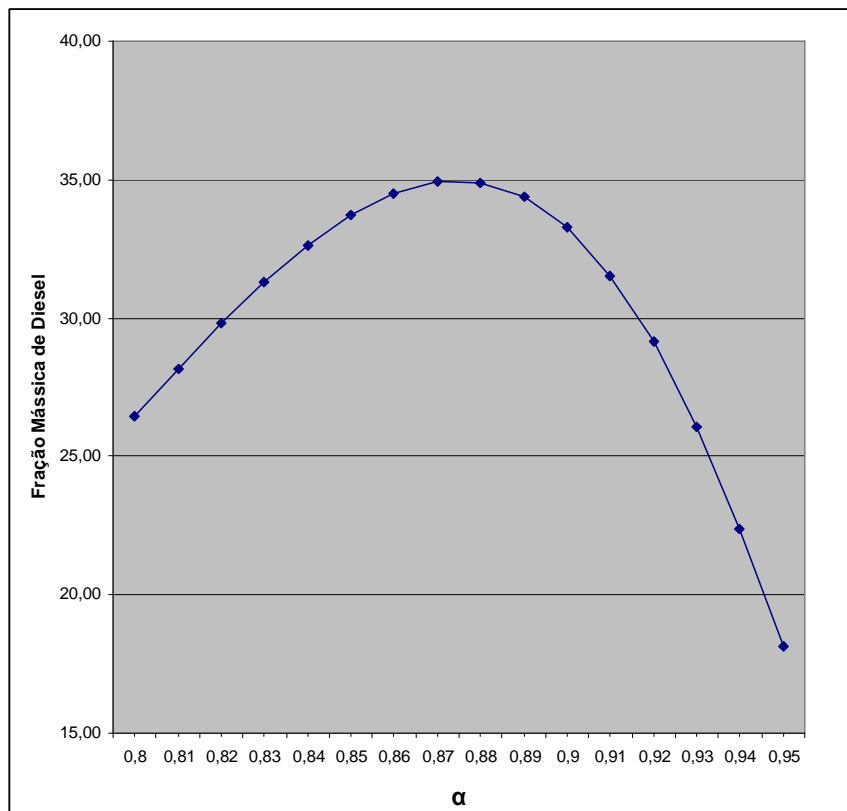


Figura 4.1 – Relação entre diesel e α (Elaboração Própria)

Conforme a Figura 4.1, os valores de alfa que maximizam a fração mássica de diesel no efluente do reator FT variam, muito proximamente, entre 0,87 e 0,88. Vamos adotar o valor de α igual a 0,87 no qual atingimos o rendimento de 34,92% em massa do efluente da reação FT. Portanto, caso estejamos interessados em maximizar a fração diesel no efluente do reator FT, devemos buscar um catalisador e condições operacionais adequadas que nos possibilitem tal feito. Entretanto, deve-se tomar cuidado, pois esta conclusão é válida apenas se considerarmos a etapa da síntese de FT sem levar em consideração a etapa de beneficiamento dos produtos.

Para JPT (2006), a maximização de diesel em processo GTL ocorre quando a síntese de FT produz um rendimento elevado em parafinas de elevada massa molar, que, por sua vez, na etapa de beneficiamento, sofrerão um hidroprocessamento brando visando maximizar a geração da fração diesel. Desta forma, além do diesel gerado na reação de FT, as parafinas também serão convertidas em diesel elevando o rendimento final em diesel na matriz dos produtos.

Tendo isto, em mente e a título de comparação, foi simulada a síntese de FT para um α de 0,95, valor este que é comumente encontrado na literatura especializada quando se objetiva maximizar a geração de parafinas pesadas no reator.

Os resultados desta simulação para os α de 0,87 e 0,95 são apresentados no item 4.3 -Resultados do Fluxograma.

4.2 - A influência do Fator de Probabilidade de Crescimento de Cadeia (α)

Para avaliar a influência do fator de probabilidade de crescimento de cadeia (α), principal parâmetro na distribuição teórica de ASF, na síntese de Fischer-Tropsch, foi elaborado um trabalho onde foram obtidas diversas figuras (ver na sequência) tendo com referência sempre a obtenção de 100 bpd de diesel visando relativizar alguns dados essenciais para o nosso trabalho. Por isto foram adotados alguns valores para α entre 0,75 e 1,0, já que o máximo de diesel ocorre em 0,87 como já foi exemplificado anteriormente.

A Figura 4.2 apresenta a quantidade de gás de síntese, assumindo a premissa de 90% de conversão em CO que entra no reator de FT para gerar 100 bpd de diesel. Para os valores de α menores que 0,20 e maiores 0,99 a fração de diesel não foi gerada.

Por este gráfico fica claro que a quantidade CO + H₂ requerida para baixos valores de α é totalmente inviável. Seriam necessários quase 81 bilhões de metros cúbicos normais por dia (Nm³/d) de gás de síntese.

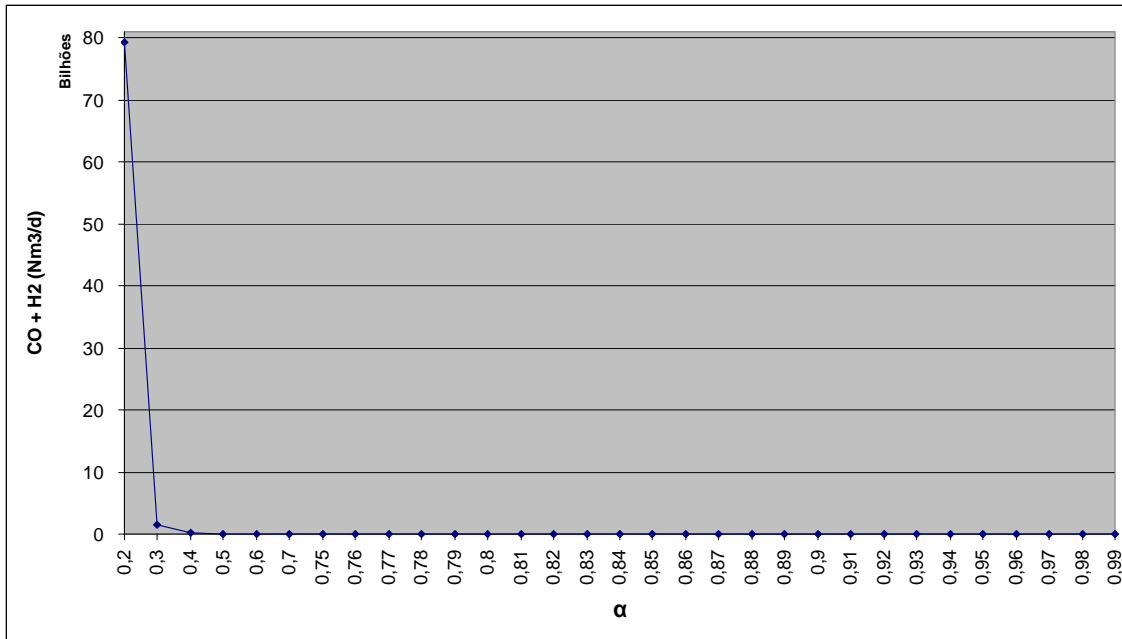


Figura 4.2 – Relação 1 entre a carga de CO+H₂ e α (Elaboração Própria)

Já a Figura 4.3, procura mostrar que para altos valores de α , a geração de diesel também é inviável se considerarmos a quantidade de gás de síntese necessária. Para um α de 0,98 seria necessário a geração de mais de 1,4 milhão Nm³/d de CO + H₂.

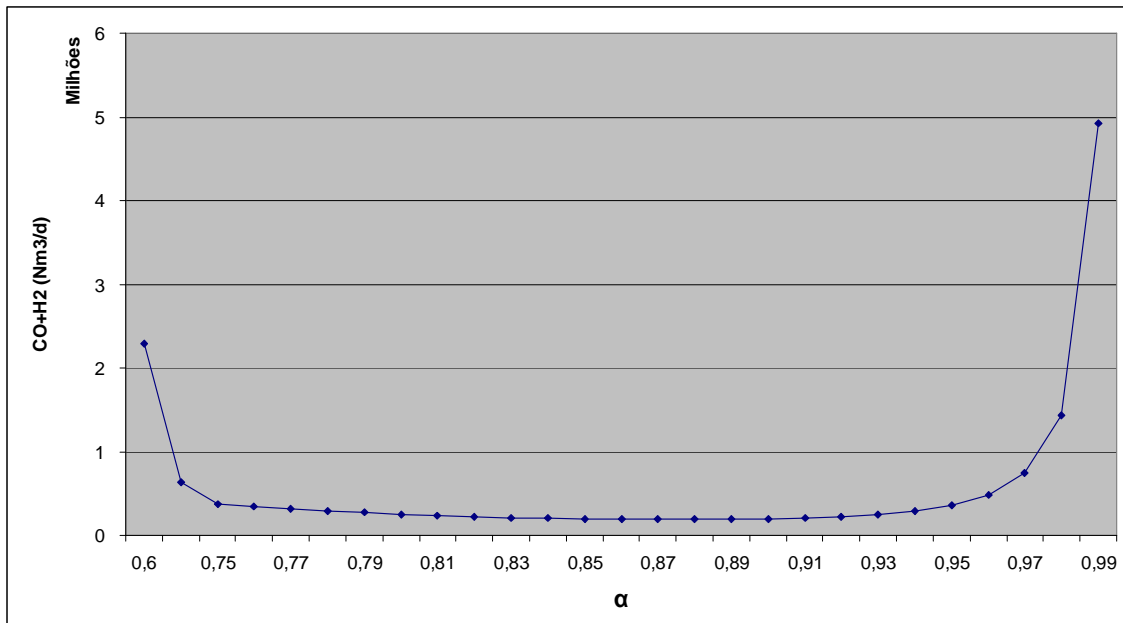


Figura 4.3 – Relação 2 entre a carga de CO+H₂ e α (Elaboração Própria)

Considerando o intervalo de α que propiciaria a maior geração de diesel na Figura 4.4, percebe-se que o α que maximiza diesel (0,87) também é aquele que consome menor quantidade de gás de síntese, cerca de 189.434 Nm³/d.

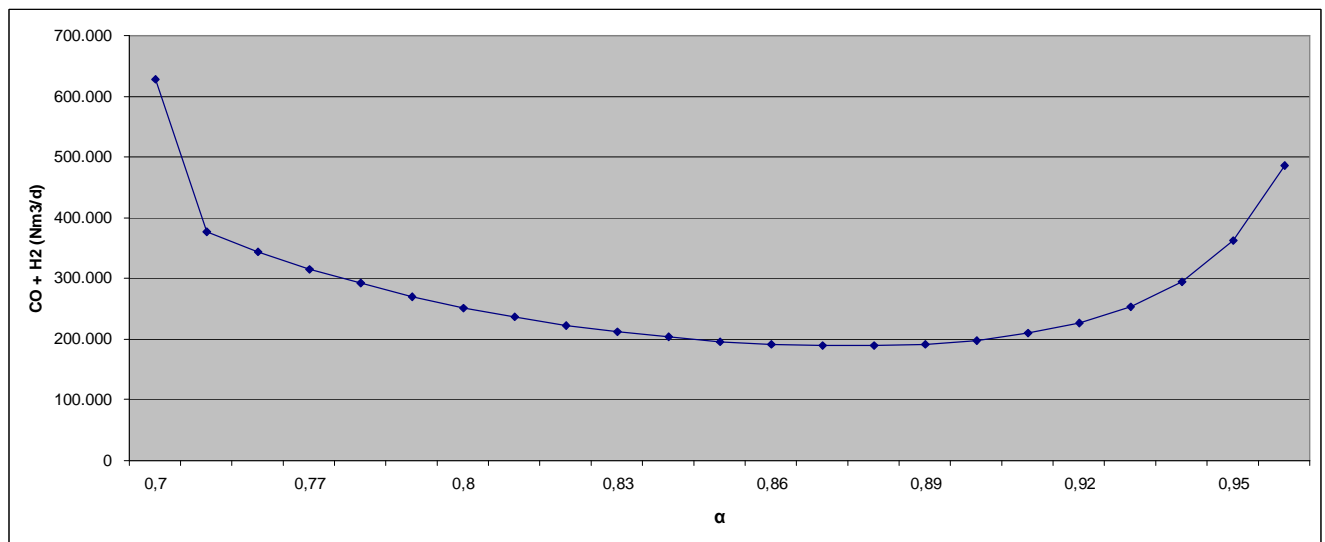
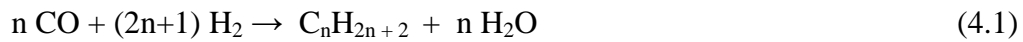


Figura 4.4 – Relação 3 entre a carga de CO+H₂ e α (Elaboração Própria)

Também podemos verificar como a relação molar H₂/CO varia com o α . A estequiometria da reação de Fischer-Tropsch está representada abaixo, para a formação de parafinas (Reação 4.1) e olefinas (Reação 4.2).



No caso da formação de olefinas, para qualquer valor de n diferente de 1, pois para a formação de ligação dupla entre carbonos é necessário, no mínimo, 2 átomos de carbono, a relação H_2/CO será sempre um valor em torno de 2,0.

Para as parafinas isto não ocorre, a relação H_2/CO é dada pela equação abaixo:

$$(2n + 1) / n \quad (4.3)$$

Portanto, quanto maior o valor de n , mais a relação H_2/CO se aproximará de 2,0 e, para baixos valores de n , esta relação tenderá a se elevar gradualmente. Quando α aproxima-se de valores inferiores a 0,50, a maior parte do efluente de Fischer-Tropsch é composta por metano e olefinas leves que podem interessar à indústria petroquímica, a relação estequiométrica de H_2/CO fica em torno de 3,0, conforme observado na Figura 4.5.

No gráfico da Figura 4.5, não está clara a contribuição de olefinas e parafinas na relação H_2/CO , mas os comentários acima devem ser observados. Caso esta mesma curva fosse elaborada para catalisadores à base de ferro, que geram mais olefinas do que parafinas, provavelmente a curva será diferente. Outra observação importante é que para valores de α entre 0,85 até 0,95, faixa esta na qual é possível maximizar diesel, seja apenas pelo α , ou pelo hidrocraqueamento das parafinas pesadas geradas, a relação H_2/CO deverá ser aproximadamente 2,1, conforme encontramos na literatura especializada.

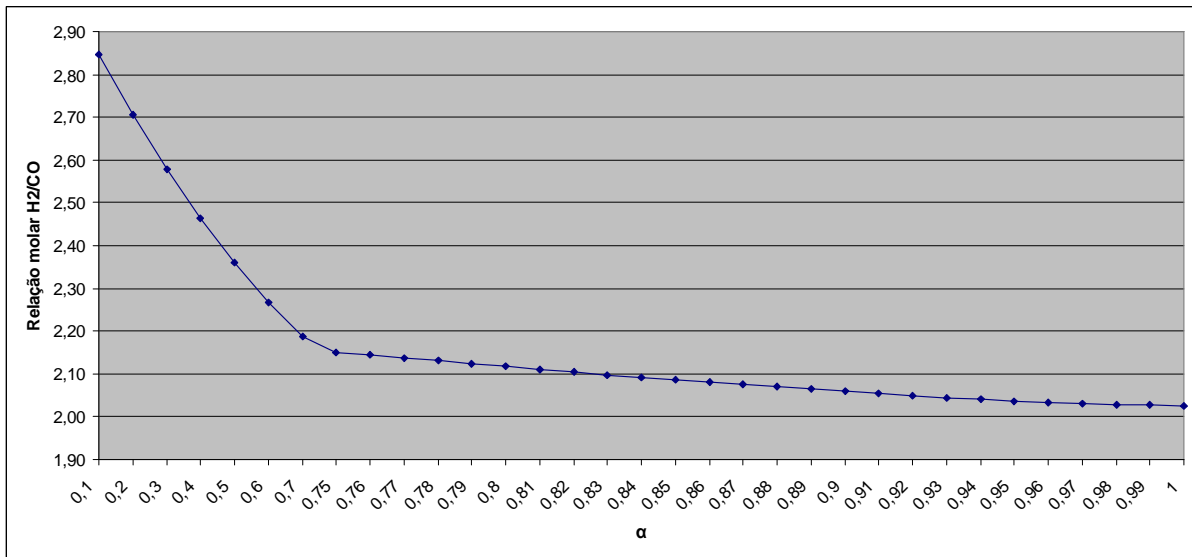


Figura 4.5 – Influência do α na relação molar H₂/ CO (Elaboração Própria)

A geração de algumas frações de derivados do petróleo como GLP, nafta petroquímica, diesel e parafinas pesadas em função do α , estão expostos na Figura 4.6. Como já mencionado, tomou-se como referência a obtenção de 100 bpd de diesel, podendo ser observado no gráfico a variação dos demais produtos.

Com α entre 0,87 e 0,90, todos os produtos estão abaixo dos 100 bpd de diesel que era nosso objetivo. Num valor em torno de 0,87, temos o maior rendimento na fração diesel versus GLP (33 bpd), nafta petroquímica (93 bpd) e parafinas pesadas (54 bpd). Também é possível observar na Figura 4.6 como as frações de GLP e nafta petroquímica aumentam para alfas menores que 0,87 e como a fração de parafinas pesadas aumenta para valores superiores a 0,90.

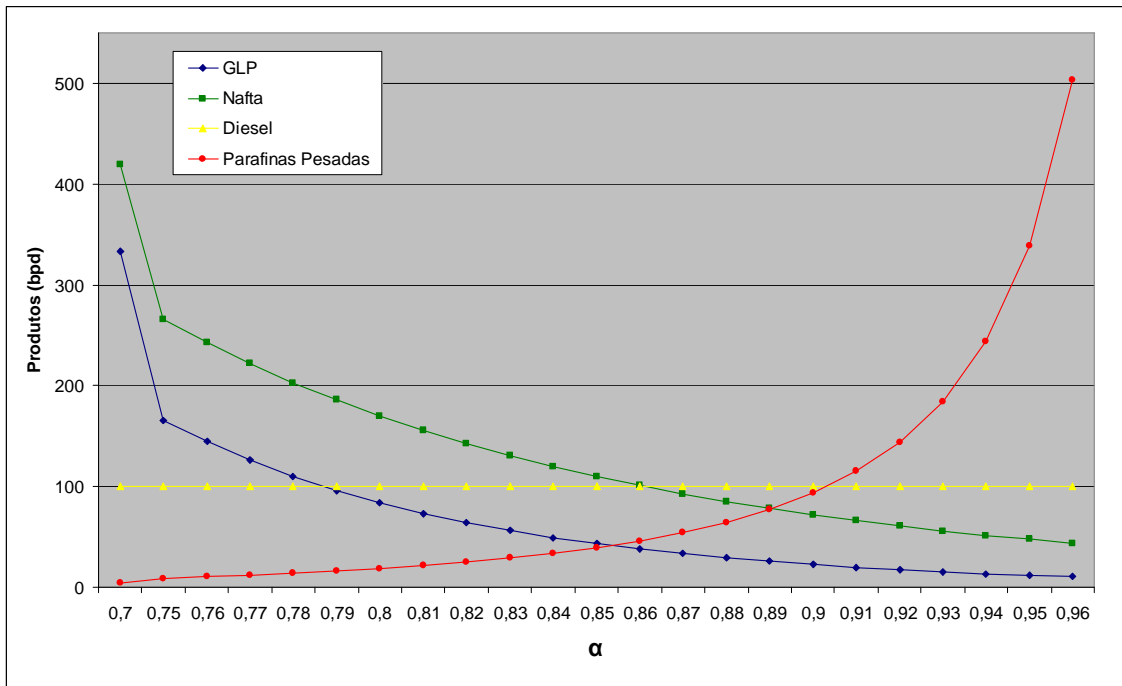


Figura 4.6 – Influência do α na distribuição de produtos (Elaboração Própria)

4.3 - Resultados do Fluxograma

Conforme exposto anteriormente, sabe-se que na prática um maior rendimento em parafinas pesadas é o objetivo para depois hidroprocessá-las transformando-as em diesel. Por este motivo foi elaborado o fluxograma abaixo, similar ao montado para o α de 0,87, porém neste o valor de α adotado é 0,95. As informações sobre nomenclatura dos equipamentos da Tabela 3.3 continuam válidas para este novo fluxograma.

Comparando os dados dos dois fluxogramas poucas informações são alteradas, pois os parâmetros de temperatura e pressão já estão definidos. A mudança significativa se dá na distribuição dos produtos, como já era esperado. Para o α de 0,95, são gerados 339 bpd de parafinas pesadas, enquanto para um α de 0,87 temos 54 bpd.

A quantidade de gás de síntese necessária para os 100 bpd de diesel aumenta em α 0,95, mas se a etapa de hidroprocessamento fosse considerada, certamente este valor seria menor, pois além do diesel gerado no reator FT, ainda haveria a transformação das parafinas em mais diesel na seção de beneficiamento. As informações sobre as correntes e dados do reator de FT nas condições simuladas para os dois α estão disponíveis no Apêndice. A Tabela 4.1 apresenta um resumo dos resultados.

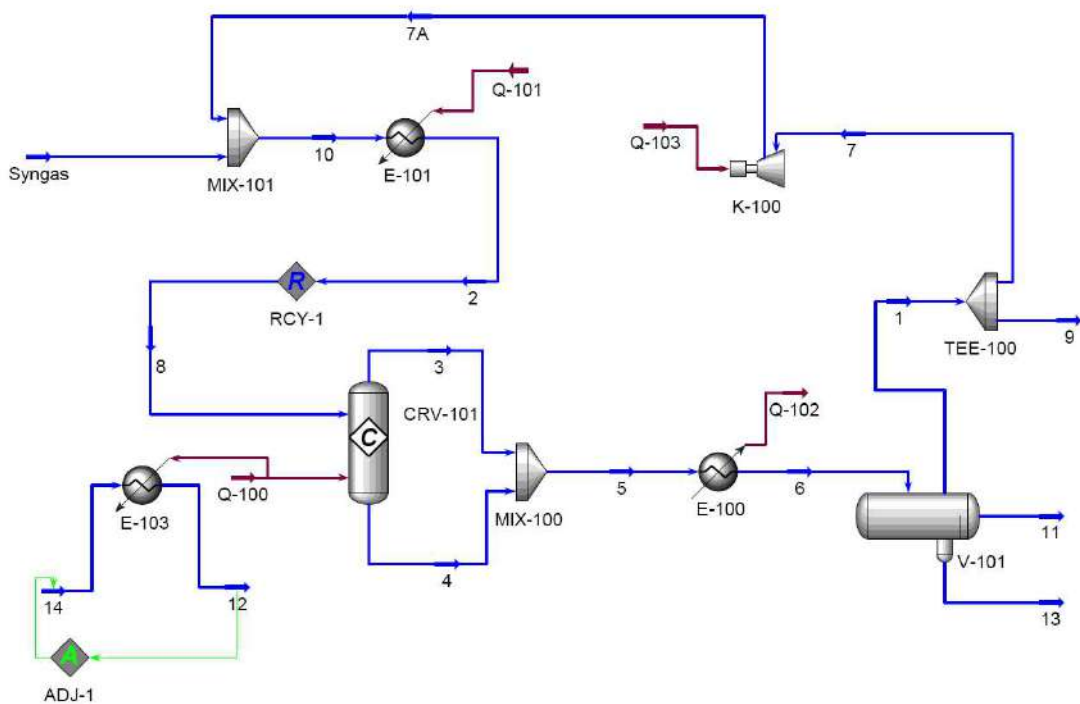


Figura 4.7 Fluxograma da Síntese de FT para α 0,95 (Elaboração Própria)

Tabela 4.1 – Dados das correntes para α de 0,87

Corrente	Syngas	10	8	5	6	13	11	1	9	7	7A	14
Temperatura (°C)	40	44,07	220	240	50	50	50	50	50	50	81,9	100
Pressão (KPa)	2550	2550	2452	1952	1854	1854	1854	1854	1854	1854	2550	199,4
Vazão (Kgmol/h)	353	383	381,3	168,4	168,4	109,1	9,26	49,98	19,99	29,99	29,99	413,9
Vazão (Kg/h)	3701	4198	4178	4178	4178	1966	1388	824,2	329,7	494,5	494,5	7457

Tabela 4.2 – Dados das correntes para α de 0,95

Corrente	Syngas	10	8	5	6	13	11	1	9	7	7A	14
Temperatura (°C)	40	43,21	220	240	50	50	50	50	50	50	88,13	100
Pressão (KPa)	2550	2550	2452	1952	1854	1854	1854	1854	1854	1854	2550	199,4
Vazão (Kgmol/h)	785	836,5	836,1	345,4	345,4	247,5	12,08	85,76	34,3	51,46	51,46	952,9
Vazão (Kg/h)	8317	8964	8962	8962	8962	4459	3423	1079	431,7	647,6	647,6	17170

5 - Conclusão

O processo GTL vem se confirmando como um modelo competitivo para o aproveitamento do Gás Natural em diversas locais do mundo, podendo inclusive ser implantado do Brasil. As novas descobertas de campos de petróleo e gás no país, principalmente com a grande promessa dos estudos da camada pré-sal pela PETROBRAS, fato inédito no mundo, e as condições de distância da costa nas quais estes campos se situam, contribuem para que projetos de “GTL embarcado” sejam cada vez mais competitivos e, por conseguinte, desenvolvidos.

Adicionalmente caso seja de interessante para o país desenvolver o mercado nacional ou até mesmo internacional de combustíveis e lubrificantes *premium*, deve-se considerar o desenvolvimento de uma planta GTL, seja costa afora ou costa adentro e, portanto, trabalhos como este podem ajudar no desenvolvimento desta tecnologia no Brasil.

O objetivo principal de simular a síntese Fischer-Tropsch foi alcançado, utilizando o modelo de distribuição de ASF sendo, inclusive, proposto um fluxograma para o processo. Para trabalhos futuros, a complementação deste fluxograma incluindo as etapas de geração do gás de síntese a partir do GN, o beneficiamento dos produtos e a integração energética enriquecerá este trabalho e contribuirá ainda mais para o desenvolvimento da tecnologia GTL no país.

A parte inicial deste trabalho fornece um panorama futuro das possibilidades de utilização do Gás Natural na matriz energética brasileira. Somando-se a isto o escopo utilizado (síntese de FT) e as premissas adotadas esperamos disponibilizar um material que seja útil para ser utilizado em diversos trabalhos ao longo deste país.

Um diferencial aqui adotado foi o modelo de simulação escolhido, que não leva em consideração dados experimentais da reação de Fischer-Tropsch, pois poucos são aqueles que detêm o conhecimento completo das reações envolvidas no reator FT. Para empresas e pesquisadores interessados no desenvolvimento da tecnologia desta síntese, aqui são encontrados parâmetros para uma estimativa inicial e possibilidades de avaliações econômicas preliminares, enquanto os dados experimentais não são gerados. Inclusive podendo balizar a compra de catalisadores para as etapas iniciais dos estudos,

visto que o fator de probabilidade de crescimento da cadeia (α) é função direta do catalisador utilizado.

6 - Referências Bibliográficas

Almeida, E.L.F. Bomtempo, J.V. Bicalho, R.G. (2002), “Conversão de gás natural a hidrocarbonetos líquidos por rota tradicional”, Relatório de pesquisa

Almeida, E.L.F. (2003), “Custos de Projetos GTL: uma Proposta para Avaliação Econômica de Projetos”, Relatório de pesquisa.

ANP - Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis, (2008a), Boletim Mensal do Gás Natural de junho de 2008.

ANP - Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis, (2008b), “Panorama Atual do Mercado de GNL”, Superintendência de Comercialização e Movimentação de Gás Natural, Rio de Janeiro.

ANP - Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis, (2008c), Dados Estatísticos, Disponível em http://www.anp.gov.br/petro/dados_estatisticos.asp, Acessado em 15/11/2008

ANP - Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis, (2001), “Indústria Brasileira de Gás Natural: Regulação Atual e Desafios Futuros”, Superintendência de Comercialização e Movimentação de Gás Natural, Rio de Janeiro.

Appel, L. G., Silva, C. H, Fraga, M. A., Sugaya, M. F., Oliveira, T., (2005), “DME: O Combustível do Futuro”, Caderno de Tecnologia INT, Ministério da Ciência e Tecnologia, Instituto Nacional de Tecnologia, Rio de Janeiro.

BELLONA, (2002), “Hydrogen Technologies”, Disponível em: <http://www.interstatetraveler.us/Reference-Bibliography/Bellona-HydrogenReport.html>, acessado em 20/11/2008.

Branco, D. Alves Castelo (2008), “Análise Técnica e econômica da aplicação da Tecnologia GTL de pequena escala para a Monetização do Gás Natural Associado Remoto Offshore no Brasil, tese de monografia”, Tese (Mestrado), Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

Camargo, A. Moreira de, (2007), “Inventário do Ciclo de Vida do Metanol para as Condições Brasileiras” Tese (Mestrado), Universidade de São Paulo, Escola Politécnica, São Paulo, SP, Brasil.

Choi, G. N., Kramer, S. J., Tam, S. S., Fox, J. M., Carr, N. L., Wilson, G. R., (1996), “Design/Economics of a Once-Through Natural Gas Fischer-Tropsch Plant With Power Co-Production”

Cirilo Junior, “Produção no pré-sal em 10 anos será superior a 1 milhão de barris/dia, diz Formigli”, Folha Online, 16 setembro 2008.

CONPET - Programa Nacional da Racionalização do Uso dos Derivados do Petróleo e do Gás Natural, (2004) - Informações técnicas sobre Gás Natural

Dijk, H. A. J., (2001), “The Fischer-Tropsch Synthesis: A Mechanistic Study Using Transient Isotropic Tracing”, Tese (Doutorado) - Technische Universiteit Eindhoven, Eindhoven, Holanda.

Farias, F. Edson Mesquita, (2007), “Produção de Hidrocarbonetos Através da Síntese de Fischer-Tropsch Utilizando Catalisadores de Fe/K” Dissertação de M.Sc., Universidade Federal do Ceará, Programa de Pós-Graduação de Engenharia Química, do departamento de Engenharia Química, Fortaleza, CE, Brasil.

Gerosa, T. Magalhães, (2007), “O Estudo da Utilização do Gás Natural como Insumo para a Indústria Química e Petroquímica: Modelagem de uma Planta Gás-Química” Dissertação de M.Sc., Universidade de São Paulo, EP/FEA/IEE/IF, São Paulo, SP, Brasil.

Gomes, A. C. F. M., Abreu, A. S., Julião, A. S., Fiore, I. K., (2006), “Estudo de Viabilidade Técnica e Econômica da Tecnologia Gas to Liquids (GTL) no Brasil” Monografia do Instituto de Química da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Hee-Moon, E., Jun-Han, K., Kyoung-Ryong, J., Younh-Mo, A., (1997), “CO₂ Recovery Pilot Plant”, Korea Electric Power Research Institute, Korea.

<http://www.netl.doe.gov/publications/proceedings/97/97cl/davis.pdf>, acessado em 16/11/2008.

Jagger, B., (1997), “Developments in Fischer-Tropsch Technology”, Natural Gas Conversion IV, Studies in Surface Science and Catalysis, Vol. 107, páginas 219 a 224.

Jornal do Comércio, (2008), “Petrobras planeja transformar gás do pré-sal em óleo sintético”, Disponível em <http://jc.uol.com.br/2008/10/08/not_181697.php> Acessado em 01/11/2008

JPT, (2006), “Gas to Liquids Update”, Natural Gas Technology/Monetization, páginas 86 a 89.

Kraum, M., (1999), “Fischer-Tropsch Synthesis on Supported Cobalt-Based Catalysts: Influence of Various Preparation Methods and Supports on Catalyst Activity and Chain Growth Probability”, Tese (Doutorado), Faculty of Chemistry Ruhr-Universität Bochum.

Laan, G. Pieter. van der, (1999), “Selectivity and Scale Up of the Fischer-Tropsch Synthesis”, Universidade de Groningen, Holanda.

Luna, D., (2008), “Gás Natural e Contaminantes são desafios do Pré-Sal”, Porta Exame, 04 de setembro de 2008, Disponível em <<http://portalexame.abril.com.br/agencias/reuters/reuters-negocios/detail/gas-natural-contaminantes-sao-desafios-pre-sal-99336.shtml>>, Acessado em 03 de novembro de 2008.

O'Brien, R. J., Raje, A., Spicer, R. L., Xu, L., Bao, S., Lambert, S., Davis, B. H., (1997), "Technology Development for Iron Fischer-Tropsch Catalysts", Disponível em:

Oliveira, T., (2005), "Um Estudo de Prospecção e de Estratégias de Inovação: O Caso do Dimetil Éter (DME) e seu Uso como Combustível", Tese (Mestrado), Universidade Federal do Rio de Janeiro, EQ/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

Moritis, G. (1999). GTL technology augments gas production options. In Oil and Gas Journal Online. 97 (49), (<http://ogj.pennnet.com>).

ONIP – Organização Nacional da Indústria do Petróleo, (2006), "PLANGÁS - Plano de Antecipação da Produção de Gás Petrobras" - Gestão de Portfolio 18 de outubro. Disponível em: <http://www.onip.org.br/arquivos/Cafe12JNunes.pdf?PHPSESSID=a4a696a403b3b5368808e4c118f3740b>>. Acessado em: 10 de novembro de 2008.

PETROBRAS. Petróleo Brasileiro S.A., (2007), "Plano de Negócios 2007-2011". Disponível em: http://www2.petrobras.com.br/ri/port/ApresentacoesEventos/ConfTelefonicas/pdf/PlanoNegocios20072011_Port.pdf>. Acesso em: 10 de novembro de 2008.

Pinheiro, B. B., (2002), "Produção de Combustíveis Sintéticos a partir do Gás Natural: Evolução e Perspectivas", Tese (Mestrado), Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Economia, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

Rockwell, J. (2002), "Commercialization of ConocoPhillips GTL Technology, CWC Conference Houston", November 21-22, Texas

SHELL, (2008a), SMDS Technology and Process, Disponível em: http://www.shell.com/home/content2/my-en/shell_for_businesses/smds/smds_process.html>, acessado em 17/11/2008.

SHELL, (2008b), "Royal Dutch Shell plc, Building New Heartlands", Disponível em: <http://www->

static.shell.com/static/aboutshell/downloads/our_strategy/major_projects/shell_major_projects.pdf>, acessado em 18/11/2008.

Silva, A. Tocantins, C. Bastos, L. Pacheco, M. (2000), “Análise de alternativas de utilização do gás natural no estado do Rio de Janeiro”, Apresentado na Escola de Química

Souza, V. H. B., Feitosa, F. P., (2007), “A Utilização do Frio do GNL”, Trabalho da disciplina Engenharia do Gás Natural, Universidade Federal do Rio de Janeiro, EQ/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

Souza, B.F, (2004), “Scale-up das Unidades de Geração de Gás de Síntese para Tecnologias Gas to Liquids – GTL”, Dissertação (projeto final de graduação em Engenharia Química) – Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.


Valle, M. L. M., (2002), “Caracterização de Produtos Destinados ao Setor de Petróleo e de Lubrificantes”, Universidade Federal do Rio de Janeiro, DPO/EQ/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil


Wolkswagen, (2008), “Fischer-Tropsch Synthesis”, Disponível em <http://www.volkswagenag.com/vwag/vwcorp/content/en/innovation/fuel_and_propulsion/production/putting_the_sun_into_your_fuel_tank/fischer_tropsch_synthesis.html>, acessado em 18/11/2008.


Yakbson, D. L., Rentech, Inc., (2001), “Fischer-Tropsch (FT) Technology”, LNG-GTL Conference, Buenos Aires, Argentina.


7 - Apêndice


Dados do Reator de Fischer-Tropsch para α de 0,87


1	 TEAM LND Calgary, Alberta CANADA		Case Name: C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\IVITORMEUS\DOCUMENTOS\MON	
2			Unit Set: SI	
3			Date/Time: Wed Nov 26 01:16:09 2008	
4				
5				
6	Conversion Reactor: CRV-101			
7	CONNECTIONS			
8	Inlet Stream Connections			
9	Stream Name	From Unit Operation		
10	8	Recycle		RCY-1
11	Outlet Stream Connections			
12	Stream Name	To Unit Operation		
13	3	Mixer:		MIX-100
14	4	Mixer:		MIX-100
15	Energy Stream Connections			
16	Stream Name	From Unit Operation		
17	Q-100	Heater:		E-103
18	PARAMETERS			
19	Physical Parameters		Optional Heat Transfer: Cooling	
20	Delta P	Vessel Volume	Duty	Energy Stream
21	500.0 kPa	---	1.697e+007 kJ/h	Q-100
22	User Variables			
23	REACTION DETAILS			
24	Reaction: C1-1			
25	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
26	CO	28.01	-1	
27	H2O	18.02	1	
28	Hydrogen	2.016	-3	
29	Methane	16.04	1	
30	Reaction: C2-1			
31	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
32	CO	28.01	-2	
33	Hydrogen	2.016	-5	
34	H2O	18.02	2	
35	Ethane	30.07	1	
36	Reaction: C3-1			
37	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
38	CO	28.01	-3	
39	Hydrogen	2.016	-7	
40	Propane	44.10	1	
41	H2O	18.02	3	
42	Reaction: C4-1			
43	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
44	CO	28.01	-4	
45	H2O	18.02	4	
46	Hydrogen	2.016	-9	
47	n-Butane	58.12	1	
48	Reaction: C5-1			
49	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
50	CO	28.01	-5	
51	Hydrogen	2.016	-11	
52	H2O	18.02	5	
53	n-Pentane	72.15	1	


1	 TEAM LND Calgary, Alberta CANADA		Case Name:	C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\IVTORWEUS\DOCUMENTOS\MON
2			Unit Set:	SI
3			Date/Time:	Wed Nov 26 01:16:09 2008
4				
5				
6	Conversion Reactor: CRV-101 (continued)			
7	REACTION DETAILS			
8				
9	Reaction: C6-1			
10				
11	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
12	CO	28.01	-6 *	
13	Hydrogen	2.016	-13 *	
14	H2O	18.02	6 *	
15	n-Hexane	86.18	1 *	
16				
17	Reaction: C7-1			
18				
19	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
20	CO	28.01	-7 *	
21	Hydrogen	2.016	-15 *	
22	H2O	18.02	7 *	
23	n-Heptane	100.2	1 *	
24				
25	Reaction: C8-1			
26				
27	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
28	CO	28.01	-8 *	
29	Hydrogen	2.016	-17 *	
30	H2O	18.02	8 *	
31	n-Octane	114.2	1 *	
32				
33	Reaction: C9-1			
34				
35	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
36	CO	28.01	-9 *	
37	Hydrogen	2.016	-19 *	
38	H2O	18.02	9 *	
39	n-Nonane	128.3	1 *	
40				
41	Reaction: C10-1			
42				
43	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
44	CO	28.01	-10 *	
45	Hydrogen	2.016	-21 *	
46	H2O	18.02	10 *	
47	n-Decane	142.3	1 *	
48				
49	Reaction: C11-1			
50				
51	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
52	CO	28.01	-11 *	
53	Hydrogen	2.016	-23 *	
54	H2O	18.02	11 *	
55	n-C11	156.3	1 *	
56				
57	Reaction: C12-1			
58				
59	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
60	CO	28.01	-12 *	
61	Hydrogen	2.016	-25 *	
62	H2O	18.02	12 *	
63	n-C12	170.3	1 *	
64				
65	Reaction: C13-1			
66				
67	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
68	CO	28.01	-13 *	
69	Hydrogen	2.016	-27 *	
70	H2O	18.02	13 *	
71	n-C13	184.4	1 *	
72				
73				
74				
75				
76				
77				
78				
79				
80				
81				
82				
83				
84				
85				
86				
87				
88				
89	Hyprotech Ltd	HYSYS v3.2 (Build 5029)	Page 2 of 10	


1	 TEAM LND Calgary, Alberta CANADA		Case Name: C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\VTORMEUS\DOCUMENTOS\MON
2			Unit Set: SI
3			Date/Time: Wed Nov 26 01:16:09 2008
4			
5	Conversion Reactor: CRV-101 (continued)		
6	REACTION DETAILS		
7	Reaction: C14-1		
8	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.
9	CO	28.01	-14 *
10	Hydrogen	2.016	-29 *
11	H2O	18.02	14 *
12	n-C14	198.4	1 *
13	Reaction: C15-1		
14	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.
15	CO	28.01	-15 *
16	Hydrogen	2.016	-31 *
17	H2O	18.02	15 *
18	n-C15	212.4	1 *
19	Reaction: C16-1		
20	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.
21	CO	28.01	-16 *
22	Hydrogen	2.016	-33 *
23	H2O	18.02	16 *
24	n-C16	226.4	1 *
25	Reaction: C17-1		
26	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.
27	CO	28.01	-17 *
28	Hydrogen	2.016	-35 *
29	H2O	18.02	17 *
30	n-C17	240.5	1 *
31	Reaction: C18-1		
32	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.
33	CO	28.01	-18 *
34	Hydrogen	2.016	-37 *
35	H2O	18.02	18 *
36	n-C18	254.5	1 *
37	Reaction: C19-1		
38	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.
39	CO	28.01	-19 *
40	H2O	18.02	19 *
41	Hydrogen	2.016	-39 *
42	n-C19	268.5	1 *
43	Reaction: C20-1		
44	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.
45	CO	28.01	-20 *
46	Hydrogen	2.016	-41 *
47	H2O	18.02	20 *
48	n-C20	282.5	1 *
49	Reaction: C30-1		
50	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.
51	CO	28.01	-30 *
52	Hydrogen	2.016	-61 *
53	H2O	18.02	30 *
54	n-C30	422.8	1 *


1			Case Name:	C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\IVITORMEUS\DOCUMENTOS\IMON
2	 HYPROTECH <small>LIFECYCLE INNOVATION</small>	TEAM LND	Unit Set:	SI
3		Calgary, Alberta	Date/Time:	Wed Nov 26 01:16:09 2008
4		CANADA		
5				
6	Conversion Reactor: CRV-101 (continued)			
7	REACTION DETAILS			
8	Reaction: C2=-1			
9	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
10	CO	28.01	-2 *	
11	H2O	18.02	2 *	
12	Hydrogen	2.016	-4 *	
13	Ethylene	28.05	1 *	
14	Reaction: C3=-1			
15	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
16	Propene	42.08	1 *	
17	CO	28.01	-3 *	
18	Hydrogen	2.016	-6 *	
19	H2O	18.02	3 *	
20	Reaction: C4=-1			
21	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
22	1-Butene	56.11	1 *	
23	CO	28.01	-4 *	
24	Hydrogen	2.016	-8 *	
25	H2O	18.02	4 *	
26	Reaction: C5=-1			
27	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
28	1-Pentene	70.14	1 *	
29	CO	28.01	-5 *	
30	Hydrogen	2.016	-10 *	
31	H2O	18.02	5 *	
32	Reaction: C6=-1			
33	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
34	1-Hexene	84.16	1 *	
35	CO	28.01	-6 *	
36	Hydrogen	2.016	-12 *	
37	H2O	18.02	6 *	
38	Reaction: C7=-1			
39	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
40	1-Heptene	98.19	1 *	
41	CO	28.01	-7 *	
42	Hydrogen	2.016	-14 *	
43	H2O	18.02	7 *	
44	Reaction: C8=-1			
45	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
46	1-Octene	112.2	1 *	
47	CO	28.01	-8 *	
48	Hydrogen	2.016	-16 *	
49	H2O	18.02	8 *	
50	Reaction: C9=-1			
51	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
52	1-Nonene	126.2	1 *	
53	CO	28.01	-9 *	
54	Hydrogen	2.016	-18 *	
55	H2O	18.02	9 *	
56				
57				
58				
59				
60				
61				
62				
63				
64				
65				
66				
67				
68				
69	Hyprotech Ltd.	HYSYS v3.2 (Build 5029)	Page 4 of 10	


1	 TEAM LND Calgary, Alberta CANADA		Case Name:	C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\VI TORMEUS DOCUMENTOS\SIMON
2			Unit Set:	SI
3			Date/Time:	Wed Nov 26 01:16:09 2008
4				
5	Conversion Reactor: CRV-101 (continued)			
6	REACTION DETAILS			
7	Reaction: C10=-1			
8	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
9	1-Decene	140.2	1 '	
10	CO	28.01	-10 '	
11	Hydrogen	2.016	-20 '	
12	H2O	18.02	10 '	
13	Reaction: C11=-1			
14	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
15	1-Undecene	154.3	1 '	
16	CO	28.01	-11 '	
17	Hydrogen	2.016	-22 '	
18	H2O	18.02	11 '	
19	Reaction: C12=-1			
20	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
21	1-Dodecene	168.3	1 '	
22	CO	28.01	-12 '	
23	Hydrogen	2.016	-24 '	
24	H2O	18.02	12 '	
25	Reaction: C13=-1			
26	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
27	1-Tridecene	182.4	1 '	
28	CO	28.01	-13 '	
29	Hydrogen	2.016	-26 '	
30	H2O	18.02	13 '	
31	Reaction: C14=-1			
32	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
33	1-Tetradecen	196.4	1 '	
34	CO	28.01	-14 '	
35	Hydrogen	2.016	-28 '	
36	H2O	18.02	14 '	
37	Reaction: C15=-1			
38	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
39	1-Pentadecen	210.4	1 '	
40	CO	28.01	-15 '	
41	Hydrogen	2.016	-30 '	
42	H2O	18.02	15 '	
43	Reaction: C16=-1			
44	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
45	1-Hexadecene	224.4	1 '	
46	Hydrogen	2.016	-32 '	
47	CO	28.01	-16 '	
48	H2O	18.02	16 '	
49	Reaction: C17=-1			
50	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
51	1-Heptadecen	238.4	1 '	
52	CO	28.01	-17 '	
53	Hydrogen	2.016	-34 '	
54	H2O	18.02	17 '	
55	Reaction: C18=-1			
56	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
57	1-Octadecen	252.4	1 '	
58	CO	28.01	-18 '	
59	Hydrogen	2.016	-36 '	
60	H2O	18.02	18 '	
61	Reaction: C19=-1			
62	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
63	1-Nonadecen	266.4	1 '	
64	CO	28.01	-19 '	
65	Hydrogen	2.016	-38 '	
66	H2O	18.02	19 '	
67	Reaction: C20=-1			
68	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
69	1-Eicosen	280.4	1 '	
70	CO	28.01	-20 '	
71	Hydrogen	2.016	-40 '	
72	H2O	18.02	20 '	
73	Reaction: C21=-1			
74	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
75	1-Hentriaecen	294.4	1 '	
76	CO	28.01	-21 '	
77	Hydrogen	2.016	-42 '	
78	H2O	18.02	21 '	
79	Reaction: C22=-1			
80	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
81	1-Triaecen	308.4	1 '	
82	CO	28.01	-22 '	
83	Hydrogen	2.016	-44 '	
84	H2O	18.02	22 '	
85	Reaction: C23=-1			
86	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
87	1-Tetraecen	322.4	1 '	
88	CO	28.01	-23 '	
89	Hydrogen	2.016	-46 '	
90	H2O	18.02	23 '	
91	Reaction: C24=-1			
92	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
93	1-Pentaecen	336.4	1 '	
94	CO	28.01	-24 '	
95	Hydrogen	2.016	-48 '	
96	H2O	18.02	24 '	
97	Reaction: C25=-1			
98	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
99	1-Hexaecen	350.4	1 '	
100	CO	28.01	-25 '	
101	Hydrogen	2.016	-50 '	
102	H2O	18.02	25 '	
103	Reaction: C26=-1			
104	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
105	1-Heptaecen	364.4	1 '	
106	CO	28.01	-26 '	
107	Hydrogen	2.016	-52 '	
108	H2O	18.02	26 '	
109	Reaction: C27=-1			
110	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
111	1-Octaecen	378.4	1 '	
112	CO	28.01	-27 '	
113	Hydrogen	2.016	-54 '	
114	H2O	18.02	27 '	
115	Reaction: C28=-1			
116	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
117	1-Nonaecen	392.4	1 '	
118	CO	28.01	-28 '	
119	Hydrogen	2.016	-56 '	
120	H2O	18.02	28 '	
121	Reaction: C29=-1			
122	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
123	1-Decaecen	406.4	1 '	
124	CO	28.01	-29 '	
125	Hydrogen	2.016	-58 '	
126	H2O	18.02	29 '	
127	Reaction: C30=-1			
128	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
129	1-Undecaecen	420.4	1 '	
130	CO	28.01	-30 '	
131	Hydrogen	2.016	-60 '	
132	H2O	18.02	30 '	
133	Reaction: C31=-1			
134	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
135	1-Dodecaecen	434.4	1 '	
136	CO	28.01	-31 '	
137	Hydrogen	2.016	-62 '	
138	H2O	18.02	31 '	
139	Reaction: C32=-1			
140	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
141	1-Tridecaecen	448.4	1 '	
142	CO	28.01	-32 '	
143	Hydrogen	2.016	-64 '	
144	H2O	18.02	32 '	
145	Reaction: C33=-1			
146	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
147	1-Tetradecaecen	462.4	1 '	
148	CO	28.01	-33 '	
149	Hydrogen	2.016	-66 '	
150	H2O	18.02	33 '	
151	Reaction: C34=-1			
152	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
153	1-Pentadecaecen	476.4	1 '	
154	CO	28.01	-34 '	
155	Hydrogen	2.016	-68 '	
156	H2O	18.02	34 '	
157	Reaction: C35=-1			
158	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
159	1-Hexadecaecen	490.4	1 '	
160	CO	28.01	-35 '	
161	Hydrogen	2.016	-70 '	
162	H2O	18.02	35 '	
163	Reaction: C36=-1			
164	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
165	1-Heptadecaecen	504.4	1 '	
166	CO	28.01	-36 '	
167	Hydrogen	2.016	-72 '	
168	H2O	18.02	36 '	
169	Reaction: C37=-1			
170	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
171	1-Octadecaecen	518.4	1 '	
172	CO	28.01	-37 '	
173	Hydrogen	2.016	-74 '	
174	H2O	18.02	37 '	
175	Reaction: C38=-1			
176	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
177	1-Nonadecaecen	532.4	1 '	
178	CO	28.01	-38 '	
179	Hydrogen	2.016	-76 '	
180	H2O	18.02	38 '	
181	Reaction: C39=-1			
182	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
183	1-Eicosaecen	546.4	1 '	
184	CO	28.01	-39 '	
185	Hydrogen	2.016	-78 '	
186	H2O	18.02	39 '	
187	Reaction: C40=-1			
188	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
189	1-Triaecen	560.4	1 '	
190	CO	28.01	-40 '	
191	Hydrogen	2.016	-80 '	
192	H2O	18.02	40 '	
193	Reaction: C41=-1			
194	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
195	1-Tetraecen	574.4	1 '	
196	CO	28.01	-41 '	
197	Hydrogen	2.016	-82 '	
198	H2O	18.02	41 '	
199	Reaction: C42=-1			
200	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
201	1-Pentaecen	588.4	1 '	
202	CO	28.01	-42 '	
203	Hydrogen	2.016	-84 '	
204	H2O	18.02	42 '	
205	Reaction: C43=-1			
206	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
207	1-Hexaecen	602.4	1 '	
208	CO	28.01	-43 '	
209	Hydrogen	2.016	-86 '	
210	H2O	18.02	43 '	
211	Reaction: C44=-1			
212	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
213	1-Heptaecen	616.4	1 '	
214	CO	28.01	-44 '	
215	Hydrogen	2.016	-88 '	
216	H2O	18.02	44 '	
217	Reaction: C45=-1			
218	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
219	1-Octaecen	630.4	1 '	
220	CO	28.01	-45 '	
221	Hydrogen	2.016	-90 '	
222	H2O	18.02	45 '	
223	Reaction: C46=-1			
224	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
225	1-Nonaecen	644.4	1 '	
226	CO	28.01	-46 '	
227	Hydrogen	2.016	-92 '	
228	H2O	18.02	46 '	
229	Reaction: C47=-1			
230	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
231	1-Decaecen	658.4	1 '	
232	CO	28.01	-47 '	
233	Hydrogen	2.016	-94 '	
234	H2O	18.02	47 '	
235	Reaction: C48=-1			
236	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
237	1-Undecaecen	672.4	1 '	
238	CO	28.01	-48 '	
239	Hydrogen	2.016	-96 '	
240	H2O	18.02	48 '	
241	Reaction: C49=-1			
242	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
243	1-Dodecaecen	686.4	1 '	
244	CO	28.01	-49 '	
245	Hydrogen	2.016	-98 '	
246	H2O	18.02	49 '	
247	Reaction: C50=-1			
248	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
249	1-Tridecaecen	700.4	1 '	
250	CO	28.01	-50 '	
251	Hydrogen	2.016	-100 '	
252	H2O	18.02	50 '	
253	Reaction: C51=-1			
254	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
255	1-Tetradecaecen	714.4	1 '	
256	CO	28.01	-51 '	
257	Hydrogen	2.016	-102 '	
258	H2O	18.02	51 '	
259	Reaction: C52=-1			
260	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
261	1-Pentadecaecen	728.4	1 '	
262	CO	28.01	-52 '	
263	Hydrogen	2.016	-104 '	
264	H2O	18.02	52 '	
265	Reaction: C53=-1			
266	Component	Mole Weight		

1	 TEAM LND Calgary, Alberta CANADA			Case Name: C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\WITORMEUS\DOCUMENTOS\MON			
2				Unit Set: SI			
3				Date/Time: Wed Nov 26 01:16:09 2008			
4							
5	Conversion Reactor: CRV-101 (continued)						
6	REACTION DETAILS						
7	Reaction: C18=-1						
8	Component		Mole Weight		Stoichiometric Coeff.		
9	1-Octadecene		252.5				1 *
10	CO		28.01				-18 *
11	Hydrogen		2.016				-36 *
12	H2O		18.02				18 *
13	Reaction: C19=-1						
14	Component		Mole Weight		Stoichiometric Coeff.		
15	1-Nonadecene		266.5				1 *
16	CO		28.01				-19 *
17	Hydrogen		2.016				-38 *
18	H2O		18.02				19 *
19	Reaction: C20=-1						
20	Component		Mole Weight		Stoichiometric Coeff.		
21	1-Eicosene		280.5				1 *
22	CO		28.01				-20 *
23	Hydrogen		2.016				-40 *
24	H2O		18.02				20 *
25	Reaction: C30=-1						
26	Component		Mole Weight		Stoichiometric Coeff.		
27	1-C30=		420.8				1 *
28	CO		28.01				-30 *
29	Hydrogen		2.016				-60 *
30	H2O		18.02				30 *
31	REACTION RESULTS FOR : Set-2						
32	Extents						
33	Name	Rank	Specified % Conversion	Use Default	Actual % Conversion	Base Component	Reaction Extent (kgmole/h)
34	C1-1	0 *	1.34	Yes	1.340	CO	1.633
35	C2-1	0 *	1.39	Yes	1.390	CO	0.8471
36	C3-1	0 *	1.56	Yes	1.560	CO	0.6338
37	C4-1	0 *	1.89	Yes	1.890	CO	0.5759
38	C5-1	0 *	2.22	Yes	2.220	CO	0.5412
39	C6-1	0 *	2.28	Yes	2.280	CO	0.4631
40	C7-1	0 *	2.30	Yes	2.300	CO	0.4005
41	C8-1	0 *	2.28	Yes	2.280	CO	0.3474
42	C9-1	0 *	2.22	Yes	2.220	CO	0.3006
43	C10-1	0 *	2.14	Yes	2.140	CO	0.2608
44	C11-1	0 *	2.13	Yes	2.130	CO	0.2360
45	C12-1	0 *	2.08	Yes	2.080	CO	0.2113
46	C13-1	0 *	2.07	Yes	2.070	CO	0.1941
47	C14-1	0 *	1.99	Yes	1.990	CO	0.1732
48	C15-1	0 *	1.91	Yes	1.910	CO	0.1552
49	C16-1	0 *	1.83	Yes	1.830	CO	0.1394
50	C17-1	0 *	1.73	Yes	1.730	CO	0.1240
51	C18-1	0 *	1.64	Yes	1.640	CO	0.1110
52	C19-1	0 *	1.54	Yes	1.540	CO	9.879e-002
53	C20-1	0 *	1.46	Yes	1.460	CO	8.897e-002
54	C30-1	0 *	15.55	Yes	15.55	CO	0.6317
55	C2=-1	0 *	1.18	Yes	1.180	CO	0.7191
56	C3=-1	0 *	1.84	Yes	1.840	CO	0.7475
57	C4=-1	0 *	2.08	Yes	2.080	CO	0.6338
58	Hyprotech Ltd.			HYSYS v3.2 (Build 5029)			Page 6 of 10


1	 TEAM LND Calgary, Alberta CANADA				Case Name: C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\IVITOR\MEUS DOCUMENTOS\IMON			
2					Unit Set: SI			
3					Date/Time: Wed Nov 26 01:16:09 2008			
4								
5	Conversion Reactor: CRV-101 (continued)							
6	REACTION RESULTS FOR : Set-2							
7	Extents							
8								
9								
10								
11								
12								
13	Name	Rank	Specified % Conversion	Use Default	Actual % Conversion	Base Component	Reaction Extent (kgmole/h)	
14								
15	C5=-1	0 *	2.11	Yes	2.110	CO	0.5143	
16	C6=-1	0 *	2.24	Yes	2.240	CO	0.4550	
17	C7=-1	0 *	2.30	Yes	2.300	CO	0.4005	
18	C8=-1	0 *	2.30	Yes	2.300	CO	0.3504	
19	C9=-1	0 *	2.27	Yes	2.270	CO	0.3074	
20	C10=-1	0 *	2.20	Yes	2.200	CO	0.2681	
21	C11=-1	0 *	2.02	Yes	2.020	CO	0.2238	
22	C12=-1	0 *	1.87	Yes	1.870	CO	0.1899	
23	C13=-1	0 *	1.65	Yes	1.650	CO	0.1547	
24	C14=-1	0 *	1.49	Yes	1.490	CO	0.1297	
25	C15=-1	0 *	1.34	Yes	1.340	CO	0.1089	
26	C16=-1	0 *	1.19	Yes	1.190	Hydrogen	9.358e-002	
27	C17=-1	0 *	1.06	Yes	1.060	CO	7.600e-002	
28	C18=-1	0 *	0.93	Yes	0.9300	CO	6.297e-002	
29	C19=-1	0 *	0.82	Yes	0.8200	CO	5.260e-002	
30	C20=-1	0 *	0.70	Yes	0.7000	CO	4.266e-002	
31	C30=-1	0 *	4.51	Yes	4.510	CO	0.1832	
32	Balance							
33								
34	Components	Total Inflow (kgmole/h)		Total Reaction (kgmole/h)		Total Outflow (kgmole/h)		
35								
36	Ethane	1.165		0.8471		2.012		
37	Propane	0.6692		0.6338		1.303		
38	n-Butane	0.3575		0.5759		0.9334		
39	n-Pentane	0.1552		0.5412		0.6963		
40	n-Hexane	5.258e-002		0.4631		0.5157		
41	n-Heptane	1.711e-002		0.4005		0.4176		
42	n-Octane	5.409e-003		0.3474		0.3528		
43	n-Nonane	1.737e-003		0.3006		0.3024		
44	n-Decane	5.596e-004		0.2608		0.2614		
45	Methane	2.540		1.633		4.173		
46	CO	121.9		-109.3		12.57		
47	Hydrogen	251.6		-226.8		24.89		
48	H2O	0.2024		109.3		109.5		
49	n-C11	1.947e-004		0.2360		0.2362		
50	n-C12	7.153e-005		0.2113		0.2113		
51	n-C13	2.253e-005		0.1941		0.1941		
52	n-C14	6.473e-006		0.1732		0.1733		
53	n-C15	2.700e-006		0.1552		0.1552		
54	n-C16	9.347e-007		0.1394		0.1394		
55	n-C17	3.985e-007		0.1240		0.1240		
56	n-C18	1.610e-007		0.1110		0.1110		
57	n-C19	7.066e-008		9.879e-002		9.879e-002		
58	n-C20	1.588e-008		8.897e-002		8.897e-002		
59	n-C30	6.290e-012		0.6317		0.6317		
60	Ethylene	1.035		0.7191		1.754		
61	Propene	0.8308		0.7475		1.578		
62	1-Butene	0.4371		0.6338		1.071		
63	1-Pentene	0.1713		0.5143		0.6857		
64	1-Hexene	6.375e-002		0.4550		0.5188		
65	1-Heptene	1.840e-002		0.4005		0.4189		
66	1-Octene	6.609e-003		0.3504		0.3570		
67	1-Nonene	2.099e-003		0.3074		0.3095		
68	1-Decene	6.575e-004		0.2681		0.2688		
69	Hyprotech Ltd.	HYSYS v3.2 (Build 5029)				Page 7 of 10		


1	 TEAM LND Calgary, Alberta CANADA		Case Name: C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\IVITORMEUS\DOCUMENTOS\SIMON	
2			Unit Set: SI	
3			Date/Time: Wed Nov 26 01:16:09 2008	
4				
5	Conversion Reactor: CRV-101 (continued)			
6	REACTION RESULTS FOR : Set-2			
7	Balance			
8				
9				
10				
11				
12				
13				
14	Components	Total Inflow (kgmole/h)	Total Reaction (kgmole/h)	Total Outflow (kgmole/h)
15	1-Undecene	1.905e-004	0.2238	0.2240
16	1-Dodecene	6.034e-005	0.1899	0.1900
17	1-Tridecene	1.843e-005	0.1547	0.1547
18	1-Tetradecen	5.718e-006	0.1297	0.1297
19	1-Pentadecen	1.925e-006	0.1089	0.1089
20	1-Hexadecene	6.792e-007	9.358e-002	9.358e-002
21	1-Heptadecen	1.524e-007	7.600e-002	7.600e-002
22	1-Octadecene	5.608e-008	6.297e-002	6.297e-002
23	1-Nonadecene	2.272e-008	5.260e-002	5.260e-002
24	1-Eicosene	1.034e-008	4.266e-002	4.266e-002
25	1-C30=	2.447e-009	0.1832	0.1832
26	PROPERTIES			
27				
28	8			
29				
30		Overall	Vapour Phase	
31	Vapour/Phase Fraction	1.0000	1.0000	
32	Temperature: (C)	220.0 *	220.0	
33	Pressure: (kPa)	2452 *	2452	
34	Molar Flow (kgmole/h)	381.3 *	381.3	
35	Mass Flow (kg/h)	4178	4178	
36	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	12.11	12.11	
37	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-3.065e+004	-3.065e+004	
38	Mass Enthalpy (kJ/kg)	-2796	-2796	
39	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	130.1	130.1	
40	Mass Entropy (kJ/kg-C)	11.87	11.87	
41	Heat Flow (kJ/h)	-1.168e+007	-1.168e+007	
42	Molar Density (kgmole/m3)	0.5914	0.5914	
43	Mass Density (kg/m3)	6.481	6.481	
44	Std Ideal Liq Mass Density (kg/m3)	345.1	345.1	
45	Liq Mass Density @Std Cond (kg/m3)	---	---	
46	Molar Heat Capacity (kJ/kgmole-C)	30.40	30.40	
47	Mass Heat Capacity (kJ/kg-C)	2.773	2.773	
48	Thermal Conductivity (W/m-K)	0.1358	0.1358	
49	Viscosity (cP)	1.864e-002	1.864e-002	
50	Surface Tension (dyne/cm)	---	---	
51	Molecular Weight	10.96	10.96	
52	Z Factor	1.011	1.011	
53				
54	4			
55		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase
56	Vapour/Phase Fraction	0.0000	0.0000	1.0000
57	Temperature: (C)	240.0 *	240.0	240.0
58	Pressure: (kPa)	1952	1952	1952
59	Molar Flow (kgmole/h)	1.579	0.0000	1.579
60	Mass Flow (kg/h)	478.0	0.0000	478.0
61	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	0.5974	0.0000	0.5974
62	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-3.992e+005	-1.680e+005	-3.992e+005
63	Mass Enthalpy (kJ/kg)	-1319	-7573	-1319
64	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	1364	180.5	1364
65	Mass Entropy (kJ/kg-C)	4.507	8.136	4.507
66	Heat Flow (kJ/h)	-6.303e+005	0.0000	-6.303e+005
67	Molar Density (kgmole/m3)	2.148	0.4733	2.148
68	Mass Density (kg/m3)	650.1	10.50	650.1
69	Hyprotech Ltd		HYSYS v3.2 (Build 5029)	


1	 TEAM LND Calgary, Alberta CANADA		Case Name: C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\WITORMEUS\DOCUMENTOS\MON	
2			Unit Set: SI	
3			Date/Time: Wed Nov 26 01:16:09 2008	
4				
5				
6	Conversion Reactor: CRV-101 (continued)			
7				
8				
9	PROPERTIES			
10				
11	4			
12				
13		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase
14	Std Ideal Liq Mass Density (kg/m3)	800.0	691.4	800.0
15	Liq Mass Density @Std Cond (kg/m3)	800.0	661.1	800.0
16	Molar Heat Capacity (kJ/kgmole-C)	908.6	51.83	908.6
17	Mass Heat Capacity (kJ/kg-C)	3.001	2.336	3.001
18	Thermal Conductivity (W/m-K)	0.1208	5.599e-002	0.1208
19	Viscosity (cP)	0.3388	1.746e-002	0.3388
20	Surface Tension (dyne/cm)	13.69	---	13.69
21	Molecular Weight	302.7	22.18	302.7
22	Z Factor	0.2130	0.9665	0.2130
23				
24	3			
25		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase
26	Vapour/Phase Fraction	1.0000	1.0000	0.0000
27	Temperature: (C)	240.0	240.0	240.0
28	Pressure: (kPa)	1952	1952	1952
29	Molar Flow (kgmole/h)	166.8	166.8	0.0000
30	Mass Flow (kg/h)	3700	3700	0.0000
31	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	5.352	5.352	0.0000
32	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-1.680e+005	-1.680e+005	-3.992e+005
33	Mass Enthalpy (kJ/kg)	-7573	-7573	-1319
34	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	180.5	180.5	1364
35	Mass Entropy (kJ/kg-C)	8.136	8.136	4.507
36	Heat Flow (kJ/h)	-2.802e+007	-2.802e+007	0.0000
37	Molar Density (kgmole/m3)	0.4733	0.4733	2.148
38	Mass Density (kg/m3)	10.50	10.50	650.1
39	Std Ideal Liq Mass Density (kg/m3)	691.4	691.4	800.0
40	Liq Mass Density @Std Cond (kg/m3)	661.1	661.1	800.0
41	Molar Heat Capacity (kJ/kgmole-C)	51.83	51.83	908.6
42	Mass Heat Capacity (kJ/kg-C)	2.336	2.336	3.001
43	Thermal Conductivity (W/m-K)	5.599e-002	5.599e-002	0.1208
44	Viscosity (cP)	1.746e-002	1.746e-002	0.3388
45	Surface Tension (dyne/cm)	---	---	13.69
46	Molecular Weight	22.18	22.18	302.7
47	Z Factor	0.9665	0.9665	0.2130
48				
49	DYNAMICS			
50				
51	Vessel Parameters: Initialize from Product			
52	Vessel Volume (m3)	---	Level Calculator	Vertical cylinder
53	Vessel Diameter (m)	---	Fraction Calculator	Use levels and nozzles
54	Vessel Height (m)	---	Feed Delta P (kPa)	500.0 *
55	Liquid Level Percent (%)	50.00	Vessel Pressure (kPa)	1952
56				
57	Holdup: Vessel Levels			
58	Phase	Level (m)	Percent (%)	Volume (m3)
59	Vapour	---	---	0.0000
60	Liquid	---	---	0.0000
61	Aqueous	---	---	0.0000
62				
63	Holdup: Details			
64				
65	Phase	Accumulation (kgmole/h)	Moles (kgmole)	Volume (m3)
66	Vapour	0.0000	0.0000 *	0.0000
67	Liquid	0.0000	0.0000 *	0.0000
68				
69	Hyprotech Ltd		HYSYS v3.2 (Build 5029)	
70			Page 9 of 10	


1	 TEAM LND Calgary, Alberta CANADA		Case Name: C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\IVITORMEUS\DOCUMENTOS\IMON	
2			Unit Set: SI	
3			Date/Time: Wed Nov 26 01:16:09 2008	
4				
5				
6	Conversion Reactor: CRV-101 (continued)			
7				
8				
9	Phase	Accumulation (kgmole/h)	Moles (kgmole)	Volume (m3)
10	Aqueous	0.0000	0.0000 *	0.0000
11	Total	0.0000	0.0000	0.0000
12				
13	Duty Valve Source : Utility_Properties			
14				
15	Available UA (kJ/C-h)	3.600e+005	Heat Capacity (kJ/kgmole-C)	75.00
16	Utility HoldUp (kgmole)	100.0	Inlet Temp. (C)	15.00
17	Mole Flow (kgmole/h)	100.0	Outlet Temp. (C)	15.00
18	Min. Mole Flow (kgmole/h)	---	Temp. Approach (C)	10.00
19	Max. Mole Flow (kgmole/h)	---	Heat Flow (kJ/h)	1.697e+007
20				
21	Liquid Heater Height as % of Vessel Volume			
22	Top of Heater : 5.00 % *		Bottom of Heater : 0.00 % *	
23				
24	Heat Flow into the PFR: Cooling			
25				
26				
27				
28				
29				
30				
31				
32				
33				
34				
35				
36				
37				
38				
39				
40				
41				
42				
43				
44				
45				
46				
47				
48				
49				
50				
51				
52				
53				
54				
55				
56				
57				
58				
59				
60				
61				
62				
63				
64				
65				
66				
67				
68				
69	Hyprotech Ltd.		HYSYS v3.2 (Build 5029)	


Dados do Reator de Fischer-Tropsch para α de 0,95


1			Case Name: C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\IVITORMEUS\DOCUMENTOS\MON	
2	 TEAM LND Calgary, Alberta CANADA		Unit Set: SI	
3			Date/Time: Wed Nov 26 01:13:30 2008	
4				
5				
6	Conversion Reactor: CRV-101			
7				
8	CONNECTIONS			
9				
10	Inlet Stream Connections			
11				
12	Stream Name		From Unit Operation	
13	8		Recycle RCY-1	
14				
15	Outlet Stream Connections			
16				
17	Stream Name		To Unit Operation	
18	3		Mixer: MIX-100	
19	4		Mixer: MIX-100	
20				
21	Energy Stream Connections			
22				
23	Stream Name		From Unit Operation	
24	Q-100		Heater: E-103	
25				
26	PARAMETERS			
27	Physical Parameters		Optional Heat Transfer: Cooling	
28	Delta P	Vessel Volume	Duty	Energy Stream
29	500.0 kPa *	---	3.806e+007 kJ/h	Q-100
30				
31	User Variables			
32				
33	REACTION DETAILS			
34	Reaction: C1-1			
35	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
36	C.O	28.01	-1 *	
37	H2O	18.02	1 *	
38	Hydrogen	2.016	-3 *	
39	Methane	16.04	1 *	
40				
41	Reaction: C2-1			
42	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
43	C.O	28.01	-2 *	
44	Hydrogen	2.016	-5 *	
45	H2O	18.02	2 *	
46	Ethane	30.07	1 *	
47				
48	Reaction: C3-1			
49	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
50	C.O	28.01	-3 *	
51	Hydrogen	2.016	-7 *	
52	Propane	44.10	1 *	
53	H2O	18.02	3 *	
54				
55	Reaction: C4-1			
56	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
57	C.O	28.01	-4 *	
58	H2O	18.02	4 *	
59	Hydrogen	2.016	-9 *	
60	n-Butane	58.12	1 *	
61				
62	Reaction: C5-1			
63	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
64	C.O	28.01	-5 *	
65	Hydrogen	2.016	-11 *	
66	H2O	18.02	5 *	
67	n-Pentane	72.15	1 *	
68				
69	Hyprotech Ltd.		HYSYS v3.2 (Build 5029)	


1			Case Name: C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\WITORIMEUS\DOCUMENTOS\IMON
2			Unit Set: SI
3		TEAM LND	Date/Time: Wed Nov 26 01:13:30 2008
4		Calgary, Alberta	
5		CANADA	
6	Conversion Reactor: CRV-101 (continued)		
7	REACTION DETAILS		
8	Reaction: C6-1		
9	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.
10	CO	28.01	-6 *
11	Hydrogen	2.016	-13 *
12	H2O	18.02	6 *
13	n-Hexane	86.18	1 *
14	Reaction: C7-1		
15	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.
16	CO	28.01	-7 *
17	Hydrogen	2.016	-15 *
18	H2O	18.02	7 *
19	n-Heptane	100.2	1 *
20	Reaction: C8-1		
21	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.
22	CO	28.01	-8 *
23	Hydrogen	2.016	-17 *
24	H2O	18.02	8 *
25	n-Octane	114.2	1 *
26	Reaction: C9-1		
27	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.
28	CO	28.01	-9 *
29	Hydrogen	2.016	-19 *
30	H2O	18.02	9 *
31	n-Nonane	128.3	1 *
32	Reaction: C10-1		
33	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.
34	CO	28.01	-10 *
35	Hydrogen	2.016	-21 *
36	H2O	18.02	10 *
37	n-Decane	142.3	1 *
38	Reaction: C11-1		
39	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.
40	CO	28.01	-11 *
41	Hydrogen	2.016	-23 *
42	H2O	18.02	11 *
43	n-C11	156.3	1 *
44	Reaction: C12-1		
45	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.
46	CO	28.01	-12 *
47	Hydrogen	2.016	-25 *
48	H2O	18.02	12 *
49	n-C12	170.3	1 *
50	Reaction: C13-1		
51	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.
52	CO	28.01	-13 *
53	Hydrogen	2.016	-27 *
54	H2O	18.02	13 *
55	n-C13	184.4	1 *
56			
57			
58			
59	Hyprotech Ltd.	HYSYS v3.2 (Build 5029)	Page 2 of 9
60	Licensed to: TEAM LND		* Specified by user.


1			Case Name: C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\IVITOR\MEUS DOCUMENTOS\SIMON
2	 HYPROTECH <small>LIFECYCLE INNOVATION</small>	TEAM LND	Unit Set: SI
3		Calgary, Alberta	Date/Time: Wed Nov 26 01:13:30 2008
4		CANADA	
5			
6	Conversion Reactor: CRV-101 (continued)		
7	REACTION DETAILS		
8	Reaction: C14-1		
9	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.
10	CO	28.01	-14 *
11	Hydrogen	2.016	-29 *
12	H2O	18.02	14 *
13	n-C14	198.4	1 *
14	Reaction: C15-1		
15	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.
16	CO	28.01	-15 *
17	Hydrogen	2.016	-31 *
18	H2O	18.02	15 *
19	n-C15	212.4	1 *
20	Reaction: C16-1		
21	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.
22	CO	28.01	-16 *
23	Hydrogen	2.016	-33 *
24	H2O	18.02	16 *
25	n-C16	226.4	1 *
26	Reaction: C17-1		
27	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.
28	CO	28.01	-17 *
29	Hydrogen	2.016	-35 *
30	H2O	18.02	17 *
31	n-C17	240.5	1 *
32	Reaction: C18-1		
33	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.
34	CO	28.01	-18 *
35	Hydrogen	2.016	-37 *
36	H2O	18.02	18 *
37	n-C18	254.5	1 *
38	Reaction: C19-1		
39	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.
40	CO	28.01	-19 *
41	H2O	18.02	19 *
42	Hydrogen	2.016	-39 *
43	n-C19	268.5	1 *
44	Reaction: C20-1		
45	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.
46	CO	28.01	-20 *
47	Hydrogen	2.016	-41 *
48	H2O	18.02	20 *
49	n-C20	282.5	1 *
50	Reaction: C30-1		
51	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.
52	CO	28.01	-30 *
53	Hydrogen	2.016	-61 *
54	H2O	18.02	30 *
55	n-C30	422.8	1 *
56			
57			
58			
59			
60			
61			
62			
63			
64			
65			
66			
67			
68			
69	Hyprotech Ltd.	HYSYS v3.2 (Build 5029)	Page 3 of 9


1	 TEAM LND Calgary, Alberta CANADA		Case Name:	C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\IVITOR\MEUS DOCUMENTOS\IMON
2			Unit Set:	SI
3			Date/Time:	Wed Nov 26 01:13:30 2008
4				
5				
6	Conversion Reactor: CRV-101 (continued)			
7	REACTION DETAILS			
8	Reaction: C2=-1			
9	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
10	CO	28.01	-2 *	
11	H2O	18.02	2 *	
12	Hydrogen	2.016	-4 *	
13	Ethylene	28.05	1 *	
14	Reaction: C3=-1			
15	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
16	Propene	42.08	1 *	
17	CO	28.01	-3 *	
18	Hydrogen	2.016	-6 *	
19	H2O	18.02	3 *	
20	Reaction: C4=-1			
21	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
22	1-Butene	56.11	1 *	
23	CO	28.01	-4 *	
24	Hydrogen	2.016	-8 *	
25	H2O	18.02	4 *	
26	Reaction: C5=-1			
27	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
28	1-Pentene	70.14	1 *	
29	CO	28.01	-5 *	
30	Hydrogen	2.016	-10 *	
31	H2O	18.02	5 *	
32	Reaction: C6=-1			
33	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
34	1-Hexene	84.16	1 *	
35	CO	28.01	-6 *	
36	Hydrogen	2.016	-12 *	
37	H2O	18.02	6 *	
38	Reaction: C7=-1			
39	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
40	1-Heptene	98.19	1 *	
41	CO	28.01	-7 *	
42	Hydrogen	2.016	-14 *	
43	H2O	18.02	7 *	
44	Reaction: C8=-1			
45	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
46	1-Octene	112.2	1 *	
47	CO	28.01	-8 *	
48	Hydrogen	2.016	-16 *	
49	H2O	18.02	8 *	
50	Reaction: C9=-1			
51	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.	
52	1-Nonene	126.2	1 *	
53	CO	28.01	-9 *	
54	Hydrogen	2.016	-18 *	
55	H2O	18.02	9 *	
56				
57				
58				
59				
60				
61				
62				
63				
64				
65				
66				
67				
68				
69	Hyprotech Ltd.	HYSYS v3.2 (Build 5029)	Page 4 of 9	

1	 HYPROTECH <small>LIFECYCLE INNOVATION</small>		TEAM LND		Case Name: C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\IVTOR\MEUS DOCUMENTOS\IMON
2			Calgary, Alberta	Unit Set: SI	
3			CANADA	Date/Time: Wed Nov 26 01:13:30 2008	
4					
5					
6	Conversion Reactor: CRV-101 (continued)				
7	REACTION DETAILS				
8	Reaction: C10=-1				
9	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.		
10	1-Decene	140.2	1 *		
11	CO	28.01	-10 *		
12	Hydrogen	2.016	-20 *		
13	H2O	18.02	10 *		
14	Reaction: C11=-1				
15	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.		
16	1-Undecene	154.3	1 *		
17	CO	28.01	-11 *		
18	Hydrogen	2.016	-22 *		
19	H2O	18.02	11 *		
20	Reaction: C12=-1				
21	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.		
22	1-Dodecene	168.3	1 *		
23	CO	28.01	-12 *		
24	Hydrogen	2.016	-24 *		
25	H2O	18.02	12 *		
26	Reaction: C13=-1				
27	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.		
28	1-Tridecene	182.4	1 *		
29	CO	28.01	-13 *		
30	Hydrogen	2.016	-26 *		
31	H2O	18.02	13 *		
32	Reaction: C14=-1				
33	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.		
34	1-Tetradecene	196.4	1 *		
35	CO	28.01	-14 *		
36	Hydrogen	2.016	-28 *		
37	H2O	18.02	14 *		
38	Reaction: C15=-1				
39	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.		
40	1-Pentadecene	210.4	1 *		
41	CO	28.01	-15 *		
42	Hydrogen	2.016	-30 *		
43	H2O	18.02	15 *		
44	Reaction: C16=-1				
45	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.		
46	1-Hexadecene	224.4	1 *		
47	Hydrogen	2.016	-32 *		
48	CO	28.01	-16 *		
49	H2O	18.02	16 *		
50	Reaction: C17=-1				
51	Component	Mole Weight	Stoichiometric Coeff.		
52	1-Heptadecene	238.4	1 *		
53	CO	28.01	-17 *		
54	Hydrogen	2.016	-34 *		
55	H2O	18.02	17 *		
56					
57					
58					
59					
60					
61					
62					
63					
64					
65					
66					
67					
68					
69	Hyprotech Ltd.	HYSYS v3.2 (Build 5029)		Page 5 of 9	


1	 TEAM LND Calgary, Alberta CANADA			Case Name: C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\IVITOR\MEUS DOCUMENTOS\IMON			
2				Unit Set: SI			
3				Date/Time: Wed Nov 26 01:13:30 2008			
4							
5							
6	Conversion Reactor: CRV-101 (continued)						
7	REACTION DETAILS						
8	Reaction: C18=-1						
9	Component		Mole Weight		Stoichiometric Coeff.		
10	13	1-Octadecene	252.5				1 *
11	14	CO	28.01				-18 *
12	15	Hydrogen	2.016				-36 *
13	16	H2O	18.02				18 *
14	Reaction: C19=-1						
15	Component		Mole Weight		Stoichiometric Coeff.		
16	20	1-Nonadecene	266.5				1 *
17	21	CO	28.01				-19 *
18	22	Hydrogen	2.016				-38 *
19	23	H2O	18.02				19 *
20	Reaction: C20=-1						
21	Component		Mole Weight		Stoichiometric Coeff.		
22	27	1-Eicosene	280.5				1 *
23	28	CO	28.01				-20 *
24	29	Hydrogen	2.016				-40 *
25	30	H2O	18.02				20 *
26	Reaction: C30=-1						
27	Component		Mole Weight		Stoichiometric Coeff.		
28	34	1-C30=	420.8				1 *
29	35	CO	28.01				-30 *
30	36	Hydrogen	2.016				-60 *
31	37	H2O	18.02				30 *
32	REACTION RESULTS FOR : Set-2						
33	Extents						
34	Name	Rank	Specified % Conversion	Use Default	Actual % Conversion	Base Component	Reaction Extent (kgmole/h)
35	45	C1-1	0.20	Yes	0.2000	CO	0.5508
36	46	C2-1	0.20	Yes	0.2000	CO	0.2753
37	47	C3-1	0.30	Yes	0.3000	CO	0.2753
38	48	C4-1	0.40	Yes	0.4000	CO	0.2753
39	49	C5-1	0.50	Yes	0.5000	CO	0.2753
40	50	C6-1	0.50	Yes	0.5000	CO	0.2294
41	51	C7-1	0.60	Yes	0.6000	CO	0.2360
42	52	C8-1	0.60	Yes	0.6000	CO	0.2065
43	53	C9-1	0.70	Yes	0.7000	CO	0.2141
44	54	C10-1	0.70	Yes	0.7000	CO	0.1927
45	55	C11-1	0.80	Yes	0.8000	CO	0.2002
46	56	C12-1	0.80	Yes	0.8000	CO	0.1835
47	57	C13-1	0.90	Yes	0.9000	CO	0.1908
48	58	C14-1	0.90	Yes	0.9000	CO	0.1770
49	59	C15-1	1.00	Yes	1.000	CO	0.1835
50	60	C16-1	1.00	Yes	1.000	CO	0.1721
51	61	C17-1	1.00	Yes	1.000	CO	0.1619
52	62	C18-1	1.10	Yes	1.100	CO	0.1682
53	63	C19-1	1.10	Yes	1.100	CO	0.1594
54	64	C20-1	1.10	Yes	1.100	CO	0.1514
55	65	C30-1	50.10	Yes	50.10	CO	4.598
56	66	C2=-1	0.20	Yes	0.2000	CO	0.2753
57	67	C3=-1	0.30	Yes	0.3000	CO	0.2753
58	68	C4=-1	0.40	Yes	0.4000	CO	0.2753
59	Hyprotech Ltd. HYSYS v3.2 (Build 5029) Page 6 of 9						


1					Case Name:	C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\IVTORIMEUS\DOCUMENTOS\IMON					
2	 TEAM LND Calgary, Alberta CANADA				Unit Set:	SI					
3					Date/Time:	Wed Nov 26 01:13:30 2008					
4					Conversion Reactor: CRV-101 (continued)						
5					REACTION RESULTS FOR : Set-2						
6	Extents										
7											
8											
9											
10											
11											
12											
13											
14	Name	Rank	Specified % Conversion	Use Default	Actual % Conversion	Base Component	Reaction Extent (kgmole/h)				
15	C5=-1	0 *	0.40	Yes	0.4000	CO	0.2202				
16	C6=-1	0 *	0.50	Yes	0.5000	CO	0.2294				
17	C7=-1	0 *	0.60	Yes	0.6000	CO	0.2360				
18	C8=-1	0 *	0.60	Yes	0.6000	CO	0.2065				
19	C9=-1	0 *	0.70	Yes	0.7000	CO	0.2141				
20	C10=-1	0 *	0.70	Yes	0.7000	CO	0.1927				
21	C11=-1	0 *	0.70	Yes	0.7000	CO	0.1752				
22	C12=-1	0 *	0.70	Yes	0.7000	CO	0.1606				
23	C13=-1	0 *	0.70	Yes	0.7000	CO	0.1482				
24	C14=-1	0 *	0.70	Yes	0.7000	CO	0.1377				
25	C15=-1	0 *	0.70	Yes	0.7000	CO	0.1285				
26	C16=-1	0 *	0.70	Yes	0.7000	Hydrogen	0.1219				
27	C17=-1	0 *	0.60	Yes	0.6000	CO	9.717e-002				
28	C18=-1	0 *	0.60	Yes	0.6000	CO	9.177e-002				
29	C19=-1	0 *	0.60	Yes	0.6000	CO	8.694e-002				
30	C20=-1	0 *	0.60	Yes	0.6000	CO	8.250e-002				
31	C30=-1	0 *	14.50	Yes	14.60	CO	1.331				
32	Balance										
33											
34	Components		Total Inflow (kgmole/h)	Total Reaction (kgmole/h)	Total Outflow (kgmole/h)						
35											
36	Ethane		0.4008	0.2753	0.6761						
37	Propane		0.3311	0.2753	0.6064						
38	n-Butane		0.2179	0.2753	0.4932						
39	n-Pentane		0.1108	0.2753	0.3861						
40	n-Hexane		3.850e-002	0.2294	0.2679						
41	n-Heptane		1.512e-002	0.2360	0.2511						
42	n-Octane		4.772e-003	0.2065	0.2113						
43	n-Nonane		1.817e-003	0.2141	0.2159						
44	n-Decane		5.922e-004	0.1927	0.1933						
45	Methane		0.8731	0.5506	1.424						
46	CO		275.3	-247.8	27.51						
47	Hydrogen		557.3	-504.5	52.78						
48	H2O		0.3639	247.8	248.2						
49	n-C11		2.307e-004	0.2002	0.2005						
50	n-C12		8.393e-005	0.1835	0.1836						
51	n-C13		2.895e-005	0.1906	0.1906						
52	n-C14		8.391e-006	0.1770	0.1770						
53	n-C15		3.883e-006	0.1835	0.1835						
54	n-C16		1.339e-006	0.1721	0.1721						
55	n-C17		5.633e-007	0.1619	0.1619						
56	n-C18		2.449e-007	0.1682	0.1682						
57	n-C19		1.053e-007	0.1594	0.1594						
58	n-C20		2.524e-008	0.1514	0.1514						
59	n-C30		2.540e-011	4.598	4.598						
60	Ethylene		0.4137	0.2753	0.6890						
61	Propene		0.3445	0.2753	0.6198						
62	1-Butene		0.2381	0.2753	0.5134						
63	1-Pentene		0.1017	0.2202	0.3219						
64	1-Hexene		4.733e-002	0.2294	0.2768						
65	1-Heptene		1.618e-002	0.2360	0.2522						
66	1-Octene		5.872e-003	0.2065	0.2124						
67	1-Nonene		2.107e-003	0.2141	0.2162						
68	1-Decene		6.686e-004	0.1927	0.1934						
69	Hyprotech Ltd.		HYSYS v3.2 (Build 5029)			Page 7 of 9					


1	 TEAM LND Calgary, Alberta CANADA		Case Name: C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\VTORIMEUS\DOCUMENTOS\IMON	
2			Unit Set: SI	
3			Date/Time: Wed Nov 26 01:13:30 2008	
4				
5	Conversion Reactor: CRV-101 (continued)			
6	REACTION RESULTS FOR : Set-2			
7	Balance			
8				
9				
10				
11	Balance			
12				
13	Components	Total Inflow (kgmole/h)	Total Reaction (kgmole/h)	Total Outflow (kgmole/h)
14				
15	1-Undecene	2.223e-004	0.1752	0.1754
16	1-Dodecene	7.391e-005	0.1606	0.1607
17	1-Tridecene	2.462e-005	0.1482	0.1483
18	1-Tetradecen	8.078e-006	0.1377	0.1377
19	1-Pentadecen	2.889e-006	0.1285	0.1285
20	1-Hexadecene	1.060e-006	0.1219	0.1219
21	1-Heptadecen	2.307e-007	9.717e-002	9.717e-002
22	1-Octadecene	9.097e-008	9.177e-002	9.177e-002
23	1-Nonadecene	3.904e-008	8.694e-002	8.694e-002
24	1-Eicosene	1.766e-008	8.259e-002	8.259e-002
25	1-C30=	7.396e-009	1.331	1.331
26	PROPERTIES			
27				
28	8			
29				
30		Overall	Vapour Phase	
31	Vapour/Phase Fraction	1.0000	1.0000	
32	Temperature: (C)	220.0	220.0	
33	Pressure: (kPa)	2452	2452	
34	Molar Flow (kgmole/h)	836.1	836.1	
35	Mass Flow (kg/h)	8962	8962	
36	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	25.99	25.99	
37	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-3.101e+004	-3.101e+004	
38	Mass Enthalpy (kJ/kg)	-2893	-2893	
39	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	128.7	128.7	
40	Mass Entropy (kJ/kg-C)	12.01	12.01	
41	Heat Flow (kJ/h)	-2.593e+007	-2.593e+007	
42	Molar Density (kgmole/m3)	0.5914	0.5914	
43	Mass Density (kg/m3)	6.339	6.339	
44	Std Ideal Liq Mass Density (kg/m3)	344.8	344.8	
45	Liq Mass Density @Std Cond (kg/m3)	---	---	
46	Molar Heat Capacity (kJ/kgmole-C)	29.57	29.57	
47	Mass Heat Capacity (kJ/kg-C)	2.759	2.759	
48	Thermal Conductivity (W/m-K)	0.1371	0.1371	
49	Viscosity (cP)	1.864e-002	1.864e-002	
50	Surface Tension (dyne/cm)	---	---	
51	Molecular Weight	10.72	10.72	
52	Z Factor	1.011	1.011	
53	4			
54				
55		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase
56	Vapour/Phase Fraction	0.0000	0.0000	1.0000
57	Temperature: (C)	240.0	240.0	240.0
58	Pressure: (kPa)	1952	1952	1952
59	Molar Flow (kgmole/h)	8.005	0.0000	8.005
60	Mass Flow (kg/h)	2801	0.0000	2801
61	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	3.470	0.0000	3.470
62	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-4.627e+005	-1.817e+005	-4.627e+005
63	Mass Enthalpy (kJ/kg)	-1322	-8948	-1322
64	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	1670	169.2	1670
65	Mass Entropy (kJ/kg-C)	4.773	9.264	4.773
66	Heat Flow (kJ/h)	-3.704e+006	0.0000	-3.704e+006
67	Molar Density (kgmole/m3)	1.890	0.4751	1.890
68	Mass Density (kg/m3)	661.5	8.676	661.5
69	Hyprotech Ltd.		HYSYS v3.2 (Build 5029)	


1	 TEAM LND Calgary, Alberta CANADA		Case Name: C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\IVTORIMEUS DOCUMENTOS\IMON	
2			Unit Set: SI	
3			Date/Time: Wed Nov 26 01:13:30 2008	
4				
5				
6	Conversion Reactor: CRV-101 (continued)			
7	PROPERTIES			
8	4			
9		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase
10				
11				
12				
13	Std Ideal Liq Mass Density (kg/m3)	807.3	748.9	807.3
14	Liq Mass Density @Std Cond (kg/m3)	802.1	697.4	802.1
15	Molar Heat Capacity (kJ/kgmole-C)	1054	41.14	1054
16	Mass Heat Capacity (kJ/kg-C)	3.012	2.253	3.012
17	Thermal Conductivity (W/m-K)	0.1309	5.705e-002	0.1309
18	Viscosity (cP)	0.3701	1.641e-002	0.3701
19	Surface Tension (dyne/cm)	15.21	---	15.21
20	Molecular Weight	349.9	18.28	349.9
21	Z Factor	0.2420	0.9628	0.2420
22				
23				
24				
25		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase
26	Vapour/Phase Fraction	1.0000	1.0000	0.0000
27	Temperature: (C)	240.0	240.0	240.0
28	Pressure: (kPa)	1952	1952	1952
29	Molar Flow (kgmole/h)	337.4	337.4	0.0000
30	Mass Flow (kg/h)	6161	6161	0.0000
31	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	8.226	8.226	0.0000
32	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-1.817e+005	-1.817e+005	-4.627e+005
33	Mass Enthalpy (kJ/kg)	-9948	-9948	-1322
34	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	169.2	169.2	1670
35	Mass Entropy (kJ/kg-C)	9.264	9.264	4.773
36	Heat Flow (kJ/h)	-6.129e+007	-6.129e+007	0.0000
37	Molar Density (kgmole/m3)	0.4751	0.4751	1.890
38	Mass Density (kg/m3)	8.676	8.676	661.5
39	Std Ideal Liq Mass Density (kg/m3)	748.9	748.9	807.3
40	Liq Mass Density @Std Cond (kg/m3)	697.4	697.4	802.1
41	Molar Heat Capacity (kJ/kgmole-C)	41.14	41.14	1054
42	Mass Heat Capacity (kJ/kg-C)	2.253	2.253	3.012
43	Thermal Conductivity (W/m-K)	5.705e-002	5.705e-002	0.1309
44	Viscosity (cP)	1.641e-002	1.641e-002	0.3701
45	Surface Tension (dyne/cm)	---	---	15.21
46	Molecular Weight	18.28	18.28	349.9
47	Z Factor	0.9628	0.9628	0.2420
48				
49				
50				
51				
52				
53				
54				
55				
56				
57				
58				
59				
60				
61				
62				
63				
64				
65				
66				
67				
68				
69	Hyprotech Ltd.		HYSYS v3.2 (Build 5029)	
	Licensed to: TEAM LND		Page 9 of 9	
			* Specified by user.	


Dados das Correntes para α de 0,87

1	 TEAM LND Calgary, Alberta CANADA		Case Name: C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\IVITORIMEUS\DOCUMENTOS\IMON			
2			Unit Set: SI			
3			Date/Time: Sun Nov 30 18:02:29 2008			
4						
5						
6	Material Stream: Syngas				Fluid Package: Basis-2	
7					Property Package: SRK	
8	CONDITIONS					
9		Overall	Vapour Phase			
10						
11	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000			
12	Temperature: (C)	40.00 *	40.00			
13	Pressure: (kPa)	2550 *	2550			
14	Molar Flow (kgmole/h)	353.0 *	353.0			
15	Mass Flow (kg/h)	3701	3701			
16	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	10.90	10.90			
17	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-3.559e+004	-3.559e+004			
18	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	114.5	114.5			
19	Heat Flow (kJ/h)	-1.256e+007	-1.256e+007			
20	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	---	---			
21	Material Stream: 1				Fluid Package: Basis-2	
22					Property Package: SRK	
23	CONDITIONS					
24		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase	Aqueous Phase	
25						
26	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000	
27	Temperature: (C)	50.00	50.00	50.00	50.00	
28	Pressure: (kPa)	1854	1854	1854	1854	
29	Molar Flow (kgmole/h)	49.98	49.98	0.0000	0.0000	
30	Mass Flow (kg/h)	824.2	824.2	0.0000	0.0000	
31	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	2.100	2.100	0.0000	0.0000	
32	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-4.095e+004	-4.095e+004	-2.511e+005	-2.835e+005	
33	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	133.7	133.7	369.2	59.70	
34	Heat Flow (kJ/h)	-2.047e+006	-2.047e+006	0.0000	0.0000	
35	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	---	---	0.0000	0.0000	
36	Material Stream: 4				Fluid Package: Basis-2	
37					Property Package: SRK	
38	CONDITIONS					
39		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase		
40						
41	Vapour / Phase Fraction	0.0000	0.0000	1.0000		
42	Temperature: (C)	240.0 *	240.0	240.0		
43	Pressure: (kPa)	1952	1952	1952		
44	Molar Flow (kgmole/h)	1.579	0.0000	1.579		
45	Mass Flow (kg/h)	478.0	0.0000	478.0		
46	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	0.5974	0.0000	0.5974		
47	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-3.992e+005	-1.680e+005	-3.992e+005		
48	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	1364	180.5	1364		
49	Heat Flow (kJ/h)	-6.303e+006	0.0000	-6.303e+006		
50	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	0.5974 *	0.0000	0.5974		
51	Material Stream: 3				Fluid Package: Basis-2	
52					Property Package: SRK	
53	CONDITIONS					
54		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase		
55						
56	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000	0.0000		
57	Temperature: (C)	240.0	240.0	240.0		
58	Pressure: (kPa)	1952	1952	1952		
59	Molar Flow (kgmole/h)	166.8	166.8	0.0000		
60	Mass Flow (kg/h)	3700	3700	0.0000		
61	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	5.352	5.352	0.0000		
62	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-1.680e+005	-1.680e+005	-3.992e+005		
63	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	180.5	180.5	1364		
64	Heat Flow (kJ/h)	-2.802e+007	-2.802e+007	0.0000		


1					Case Name:	C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\IVTORIMEUS\DOCUMENTOS\IMON		
2	 HYPROTECH <small>LIFECYCLE INNOVATION</small>				Unit Set:	SI		
3					TEAM LND	Calgary, Alberta	Date/Time:	Sun Nov 30 18:02:29 2008
4					CANADA			
5					Fluid Package:	Basis-2		
6	Material Stream: 3 (continued)				Property Package:	SRK		
7								
8	CONDITIONS							
9		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase				
10	Liq Vol Flow @Std Cond	(m3/h)	5.588 *	5.587	0.0000			
11					Fluid Package:	Basis-2		
12	Material Stream: 5				Property Package:	SRK		
13	CONDITIONS							
14		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase				
15	Vapour / Phase Fraction		0.9906	0.9906	0.0094			
16	Temperature:	(C)	240.0	240.0	240.0			
17	Pressure:	(kPa)	1952	1952	1952			
18	Molar Flow	(kgmole/h)	166.4	166.8	1.579			
19	Mass Flow	(kg/h)	4178	3700	478.0			
20	Std Ideal Liq Vol Flow	(m3/h)	5.949	5.352	0.5974			
21	Molar Enthalpy	(kJ/kgmole)	-1.702e+005	-1.680e+005	-3.992e+005			
22	Molar Entropy	(kJ/kgmole-C)	191.6	180.5	1364			
23	Heat Flow	(kJ/h)	-2.865e+007	-2.802e+007	-6.303e+005			
24	Liq Vol Flow @Std Cond	(m3/h)	6.188 *	6.597	0.5974			
25					Fluid Package:	Basis-2		
26	Material Stream: 6				Property Package:	SRK		
27	CONDITIONS							
28		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase	Aqueous Phase			
29	Vapour / Phase Fraction		0.2968	0.2968	0.0550	0.6482		
30	Temperature:	(C)	50.00 *	50.00	50.00	50.00		
31	Pressure:	(kPa)	1854	1854	1854	1854		
32	Molar Flow	(kgmole/h)	166.4	49.98	9.260	109.1		
33	Mass Flow	(kg/h)	4178	824.2	1388	1966		
34	Std Ideal Liq Vol Flow	(m3/h)	5.949	2.100	1.879	1.970		
35	Molar Enthalpy	(kJ/kgmole)	-2.097e+005	-4.095e+004	-2.511e+005	-2.835e+005		
36	Molar Entropy	(kJ/kgmole-C)	98.69	133.7	369.2	59.70		
37	Heat Flow	(kJ/h)	-3.531e+007	-2.047e+006	-2.326e+006	-3.094e+007		
38	Liq Vol Flow @Std Cond	(m3/h)	6.190 *	---	1.847	1.938		
39					Fluid Package:	Basis-2		
40	Material Stream: 11				Property Package:	SRK		
41	CONDITIONS							
42		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase	Aqueous Phase			
43	Vapour / Phase Fraction		0.0000	0.0000	1.0000	0.0000		
44	Temperature:	(C)	50.00	50.00	50.00	50.00		
45	Pressure:	(kPa)	1854	1854	1854	1854		
46	Molar Flow	(kgmole/h)	9.260	0.0000	9.260	0.0000		
47	Mass Flow	(kg/h)	1388	0.0000	1388	0.0000		
48	Std Ideal Liq Vol Flow	(m3/h)	1.879	0.0000	1.879	0.0000		
49	Molar Enthalpy	(kJ/kgmole)	-2.511e+005	-4.095e+004	-2.511e+005	-2.835e+005		
50	Molar Entropy	(kJ/kgmole-C)	369.2	133.7	369.2	59.70		
51	Heat Flow	(kJ/h)	-2.326e+006	0.0000	-2.326e+006	0.0000		
52	Liq Vol Flow @Std Cond	(m3/h)	1.847 *	0.0000	1.847	0.0000		
53					Fluid Package:	Basis-2		
54	Material Stream: 13				Property Package:	SRK		
55	CONDITIONS							
56		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase	Aqueous Phase			
57	Vapour / Phase Fraction		0.0000	0.0000	0.0000	1.0000		
58	Temperature:	(C)	50.00	50.00	50.00	50.00		
59	Hyprotech Ltd. HYSYS v3.2 (Build 5029) Page 2 of 5							
60	<small>Licensed to: TEAM LND * Specified by user.</small>							


1					Case Name:	C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\IVITOR\MEUS DOCUMENTOS\IMON		
2	 HYPROTECH <small>LIFE OF POLYMER INNOVATION</small>				Unit Set:	SI		
3					TEAM LND		Date/Time:	Sun Nov 30 18:02:29 2008
4					Calgary, Alberta	CANADA		
5					Fluid Package:	Basis-2		
6					Property Package:	QRK		
7	Material Stream: 13 (continued)							
8								
9	CONDITIONS							
10		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase	Aqueous Phase			
11								
12	Pressure:	(kPa)	1854	1854	1854	1854		
13	Molar Flow	(kgmole/h)	109.1	0.0000	0.0000	109.1		
14	Mass Flow	(kg/h)	1966	0.0000	0.0000	1966		
15	Std Ideal Liq Vol Flow	(m3/h)	1.970	0.0000	0.0000	1.970		
16	Molar Enthalpy	(kJ/kgmole)	-2.835e+005	-4.095e+004	-2.511e+005	-2.835e+005		
17	Molar Entropy	(kJ/kgmole-C)	59.70	133.7	369.2	59.70		
18	Heat Flow	(kJ/h)	-3.094e+007	0.0000	0.0000	-3.094e+007		
19	Liq Vol Flow @Std Cond	(m3/h)	1.938 *	0.0000	0.0000	1.938		
20					Fluid Package:	Basis-2		
21	Material Stream: 12							
22					Property Package:	QRK		
23	CONDITIONS							
24		Overall	Vapour Phase	Aqueous Phase				
25								
26	Vapour / Phase Fraction		1.0000 *	1.0000	0.0000			
27	Temperature:	(C)	100.0 *	100.0	100.0			
28	Pressure:	(kPa)	101.4	101.4	101.4			
29	Molar Flow	(kgmole/h)	413.9	413.9	0.0000			
30	Mass Flow	(kg/h)	7457	7457	0.0000			
31	Std Ideal Liq Vol Flow	(m3/h)	7.472	7.472	0.0000			
32	Molar Enthalpy	(kJ/kgmole)	-2.395e+005	-2.395e+005	-2.795e+005			
33	Molar Entropy	(kJ/kgmole-C)	181.1	181.1	71.29			
34	Heat Flow	(kJ/h)	-9.874e+007	-9.874e+007	0.0000			
35	Liq Vol Flow @Std Cond	(m3/h)	7.348 *	7.348	0.0000			
36					Fluid Package:	Basis-2		
37	Material Stream: 14							
38					Property Package:	QRK		
39	CONDITIONS							
40		Overall	Aqueous Phase					
41								
42	Vapour / Phase Fraction		0.0000	1.0000				
43	Temperature:	(C)	100.0 *	100.0				
44	Pressure:	(kPa)	199.4	199.4				
45	Molar Flow	(kgmole/h)	413.9	413.9				
46	Mass Flow	(kg/h)	7457	7457				
47	Std Ideal Liq Vol Flow	(m3/h)	7.472	7.472				
48	Molar Enthalpy	(kJ/kgmole)	-2.795e+005	-2.795e+005				
49	Molar Entropy	(kJ/kgmole-C)	71.29	71.29				
50	Heat Flow	(kJ/h)	-1.157e+008	-1.157e+008				
51	Liq Vol Flow @Std Cond	(m3/h)	7.348 *	7.348				
52					Fluid Package:	Basis-2		
53	Material Stream: 8							
54					Property Package:	QRK		
55	CONDITIONS							
56		Overall	Vapour Phase					
57								
58	Vapour / Phase Fraction		1.0000	1.0000				
59	Temperature:	(C)	220.0 *	220.0				
60	Pressure:	(kPa)	2452 *	2452				
61	Molar Flow	(kgmole/h)	381.3 *	381.3				
62	Mass Flow	(kg/h)	4178	4178				
63	Std Ideal Liq Vol Flow	(m3/h)	12.11	12.11				
64	Molar Enthalpy	(kJ/kgmole)	-3.065e+004	-3.065e+004				
65	Molar Entropy	(kJ/kgmole-C)	130.1	130.1				
66	Heat Flow	(kJ/h)	-1.168e+007	-1.168e+007				
67	Liq Vol Flow @Std Cond	(m3/h)	---	---				
68					Fluid Package:	Basis-2		
69					Property Package:	QRK		
69	Hyprotech Ltd.				HYSYS v3.2 (Build 5029)			
	Licensed to: TEAM LND				Page 3 of 5			
					* Specified by user.			


1			Case Name: C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\IVITORIMEUS\DOCUMENTOS\IMON	
2	 HYPROTECH <small>LIFEPOLE INNOVATION</small>		Unit Set: SI	
3			Date/Time: Sun Nov 30 18:02:29 2008	
4			TEAM LND Calgary, Alberta CANADA	
5				
6			Fluid Package: Basis-2	
7	Material Stream: 2		Property Package: SRK	
8				
9	CONDITIONS			
10		Overall	Vapour Phase	
11				
12	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000	
13	Temperature: (C)	220.0 *	220.0	
14	Pressure: (kPa)	2452	2452	
15	Molar Flow (kgmole/h)	383.0	383.0	
16	Mass Flow (kg/h)	4196	4196	
17	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	12.16	12.16	
18	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-3.065e+004	-3.065e+004	
19	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	130.1	130.1	
20	Heat Flow (kJ/h)	-1.174e+007	-1.174e+007	
21	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	---	---	
22			Fluid Package: Basis-2	
23	Material Stream: 7		Property Package: SRK	
24				
25	CONDITIONS			
26		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase
27				Aqueous Phase
28	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000	0.0000
29	Temperature: (C)	50.00	50.00	50.00
30	Pressure: (kPa)	1854	1854	1854
31	Molar Flow (kgmole/h)	29.99	29.99	0.0000
32	Mass Flow (kg/h)	494.5	494.5	0.0000
33	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	1.260	1.260	0.0000
34	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-4.095e+004	-4.095e+004	-2.511e+005
35	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	133.7	133.7	369.2
36	Heat Flow (kJ/h)	-1.228e+006	-1.228e+006	0.0000
37	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	---	---	0.0000
38			Fluid Package: Basis-2	
39	Material Stream: 9		Property Package: SRK	
40				
41	CONDITIONS			
42		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase
43				Aqueous Phase
44	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000	0.0000
45	Temperature: (C)	50.00	50.00	50.00
46	Pressure: (kPa)	1854	1854	1854
47	Molar Flow (kgmole/h)	19.99	19.99	0.0000
48	Mass Flow (kg/h)	329.7	329.7	0.0000
49	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	0.8399	0.8399	0.0000
50	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-4.095e+004	-4.095e+004	-2.511e+005
51	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	133.7	133.7	369.2
52	Heat Flow (kJ/h)	-8.188e+005	-8.188e+005	0.0000
53	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	---	---	0.0000
54			Fluid Package: Basis-2	
55	Material Stream: 10		Property Package: SRK	
56				
57	CONDITIONS			
58		Overall	Vapour Phase	
59				
60	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000	
61	Temperature: (C)	44.07	44.07	
62	Pressure: (kPa)	2550	2550	
63	Molar Flow (kgmole/h)	383.0	383.0	
64	Mass Flow (kg/h)	4196	4196	
65	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	12.16	12.16	
66	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-3.592e+004	-3.592e+004	
67	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	116.5	116.5	
68	Heat Flow (kJ/h)	-1.376e+007	-1.376e+007	
69	Hyprotech Ltd.		HYSYS v3.2 (Build 5029)	


1	 TEAM LND Calgary, Alberta CANADA		Case Name: C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\IVITORIMEUS\DOCUMENTOS\MON		
2			Unit Set: SI		
3			Date/Time: Sun Nov 30 18:02:29 2008		
4					
5			Fluid Package: Basis-2		
6			Property Package: SRK		
7	Material Stream: 10 (continued)				
8					
9	CONDITIONS				
10		Overall	Vapour Phase		
11					
12	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	---	---		
13					
14	Material Stream: 7A		Fluid Package: Basis-2		
15			Property Package: SRK		
16	CONDITIONS				
17		Overall	Vapour Phase		
18					
19	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000		
20	Temperature: (C)	81.90	81.90		
21	Pressure: (kPa)	2550 *	2550		
22	Molar Flow (kgmole/h)	29.99	29.99		
23	Mass Flow (kg/h)	494.5	494.5		
24	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	1.260	1.260		
25	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-3.977e+004	-3.977e+004		
26	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	134.6	134.6		
27	Heat Flow (kJ/h)	-1.193e+006	-1.193e+006		
28	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	---	---		
29					
30					
31					
32					
33					
34					
35					
36					
37					
38					
39					
40					
41					
42					
43					
44					
45					
46					
47					
48					
49					
50					
51					
52					
53					
54					
55					
56					
57					
58					
59					
60					
61					
62					
63					
64					
65					
66					
67					
68					
69	Hyprotech Ltd.		HYSYS v3.2 (Build 5029)		Page 5 of 5


Dados das Correntes para α de 0,95

1	 TEAM LND Calgary, Alberta CANADA		Case Name: C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\IVITORIMEUS\DOCUMENTOS\IMON			
2			Unit Set: SI			
3			Date/Time: Sun Nov 30 18:06:36 2008			
4						
5						
6	Material Stream: Syngas				Fluid Package: Basis-2	
7					Property Package: SRK	
8	CONDITIONS					
9		Overall	Vapour Phase			
10						
11	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000			
12	Temperature: (C)	40.00 *	40.00			
13	Pressure: (kPa)	2550 *	2550			
14	Molar Flow (kgmole/h)	785.0 *	785.0			
15	Mass Flow (kg/h)	8317	8317			
16	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	24.26	24.26			
17	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-3.606e+004	-3.606e+004			
18	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	114.7	114.7			
19	Heat Flow (kJ/h)	-2.831e+007	-2.831e+007			
20	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	---	---			
21	Material Stream: 1				Fluid Package: Basis-2	
22					Property Package: SRK	
23	CONDITIONS					
24		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase	Aqueous Phase	
25						
26	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000	
27	Temperature: (C)	50.00	50.00	50.00	50.00	
28	Pressure: (kPa)	1854	1854	1854	1854	
29	Molar Flow (kgmole/h)	85.76	85.76	0.0000	0.0000	
30	Mass Flow (kg/h)	1079	1079	0.0000	0.0000	
31	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	2.902	2.902	0.0000	0.0000	
32	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-3.939e+004	-3.939e+004	-4.972e+005	-2.835e+005	
33	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	123.6	123.6	931.4	59.70	
34	Heat Flow (kJ/h)	-3.378e+006	-3.378e+006	0.0000	0.0000	
35	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	---	---	0.0000	0.0000	
36	Material Stream: 4				Fluid Package: Basis-2	
37					Property Package: SRK	
38	CONDITIONS					
39		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase		
40						
41	Vapour / Phase Fraction	0.0000	0.0000	1.0000		
42	Temperature: (C)	240.0 *	240.0	240.0		
43	Pressure: (kPa)	1952	1952	1952		
44	Molar Flow (kgmole/h)	8.005	0.0000	8.005		
45	Mass Flow (kg/h)	2801	0.0000	2801		
46	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	3.470	0.0000	3.470		
47	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-4.627e+005	-1.817e+005	-4.627e+005		
48	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	1670	169.2	1670		
49	Heat Flow (kJ/h)	-3.704e+006	0.0000	-3.704e+006		
50	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	3.492 *	0.0000	3.492		
51	Material Stream: 3				Fluid Package: Basis-2	
52					Property Package: SRK	
53	CONDITIONS					
54		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase		
55						
56	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000	0.0000		
57	Temperature: (C)	240.0	240.0	240.0		
58	Pressure: (kPa)	1952	1952	1952		
59	Molar Flow (kgmole/h)	337.4	337.4	0.0000		
60	Mass Flow (kg/h)	6161	6161	0.0000		
61	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	8.226	8.226	0.0000		
62	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-1.817e+005	-1.817e+005	-4.627e+005		
63	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	169.2	169.2	1670		
64	Heat Flow (kJ/h)	-6.129e+007	-6.129e+007	0.0000		
65	Hyprotech Ltd.		HYSYS v3.2 (Build 5029)		Page 1 of 5	

1					Case Name:	C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\IVITORIMEUS\DOCUMENTOS\IMON	
2	 HYPROTECH <small>LIFECYCLE INNOVATION</small>				Unit Set:	SI	
3					TEAM LND Calgary, Alberta CANADA	Date/Time:	Sun Nov 30 18:06:36 2008
4							
5					Fluid Package:	Basls-2	
6					Property Package:	SRK	
7	Material Stream: 3 (continued)						
8							
9	CONDITIONS						
10		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase			
11							
12	Liq Vol Flow @Std Cond	(m3/h)	8.819 *	8.834	0.0000		
13					Fluid Package:	Basls-2	
14	Material Stream: 5				Property Package:	SRK	
15							
16	CONDITIONS						
17		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase			
18							
19	Vapour / Phase Fraction		0.9768	0.9768	0.0232		
20	Temperature:	(C)	240.0	240.0	240.0		
21	Pressure:	(kPa)	1952	1952	1952		
22	Molar Flow	(kgmole/h)	345.4	337.4	8.005		
23	Mass Flow	(kg/h)	8962	6161	2801		
24	Std Ideal Liq Vol Flow	(m3/h)	11.70	8.226	3.470		
25	Molar Enthalpy	(kJ/kgmole)	-1.882e+005	-1.817e+005	-4.627e+005		
26	Molar Entropy	(kJ/kgmole-C)	204.0	169.2	1670		
27	Heat Flow	(kJ/h)	-6.499e+007	-6.129e+007	-3.704e+006		
28	Liq Vol Flow @Std Cond	(m3/h)	12.28 *	8.834	3.452		
29					Fluid Package:	Basls-2	
30	Material Stream: 6				Property Package:	SRK	
31							
32	CONDITIONS						
33		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase	Aqueous Phase		
34							
35	Vapour / Phase Fraction		0.2483	0.2483	0.0350	0.7167	
36	Temperature:	(C)	50.00 *	50.00	50.00	50.00	
37	Pressure:	(kPa)	1854	1854	1854	1854	
38	Molar Flow	(kgmole/h)	345.4	85.76	12.08	247.6	
39	Mass Flow	(kg/h)	8962	1079	3423	4459	
40	Std Ideal Liq Vol Flow	(m3/h)	11.70	2.902	4.326	4.468	
41	Molar Enthalpy	(kJ/kgmole)	-2.304e+005	-3.939e+004	-4.972e+005	-2.835e+005	
42	Molar Entropy	(kJ/kgmole-C)	106.1	123.6	931.4	59.70	
43	Heat Flow	(kJ/h)	-7.956e+007	-3.378e+006	-6.008e+006	-7.018e+007	
44	Liq Vol Flow @Std Cond	(m3/h)	12.28 *	---	4.294	4.394	
45					Fluid Package:	Basls-2	
46	Material Stream: 11				Property Package:	SRK	
47							
48	CONDITIONS						
49		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase	Aqueous Phase		
50							
51	Vapour / Phase Fraction		0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	
52	Temperature:	(C)	50.00	50.00	50.00	50.00	
53	Pressure:	(kPa)	1854	1854	1854	1854	
54	Molar Flow	(kgmole/h)	12.08	0.0000	12.08	0.0000	
55	Mass Flow	(kg/h)	3423	0.0000	3423	0.0000	
56	Std Ideal Liq Vol Flow	(m3/h)	4.326	0.0000	4.326	0.0000	
57	Molar Enthalpy	(kJ/kgmole)	-4.972e+005	-3.939e+004	-4.972e+005	-2.835e+005	
58	Molar Entropy	(kJ/kgmole-C)	931.4	123.6	931.4	59.70	
59	Heat Flow	(kJ/h)	-6.008e+006	0.0000	-6.008e+006	0.0000	
60	Liq Vol Flow @Std Cond	(m3/h)	4.294 *	0.0000	4.294	0.0000	
61					Fluid Package:	Basls-2	
62	Material Stream: 13				Property Package:	SRK	
63							
64	CONDITIONS						
65		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase	Aqueous Phase		
66							
67	Vapour / Phase Fraction		0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	
68	Temperature:	(C)	50.00	50.00	50.00	50.00	
69	Hyprotech Ltd.				HYSYS v3.2 (Build 5029)		

1					Case Name:	C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\IVITORIMEUS\DOCUMENTOS\IMON		
2	 HYPROTECH <small>LIFE OF POLYMER INNOVATION</small>				Unit Set:	SI		
3					TEAM LND	Calgary, Alberta	Date/Time:	Sun Nov 30 18:06:36 2008
4					CANADA			
5					Fluid Package:	Basis-2		
6					Property Package:	QRK		
7	Material Stream: 13 (continued)							
8								
9	CONDITIONS							
10		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase	Aqueous Phase			
11								
12	Pressure:	(kPa)	1854	1854	1854	1854		
13	Molar Flow	(kgmole/h)	247.5	0.0000	0.0000	247.5		
14	Mass Flow	(kg/h)	4459	0.0000	0.0000	4459		
15	Std Ideal Liq Vol Flow	(m3/h)	4.458	0.0000	0.0000	4.458		
16	Molar Enthalpy	(kJ/kgmole)	-2.835e+005	-3.939e+004	-4.972e+005	-2.835e+005		
17	Molar Entropy	(kJ/kgmole-C)	59.70	123.6	931.4	59.70		
18	Heat Flow	(kJ/h)	-7.018e+007	0.0000	0.0000	-7.018e+007		
19	Liq Vol Flow @Std Cond	(m3/h)	4.394 *	0.0000	0.0000	4.394		
20					Fluid Package:	Basis-2		
21	Material Stream: 12				Property Package:	QRK		
22								
23	CONDITIONS							
24		Overall	Vapour Phase	Aqueous Phase				
25								
26	Vapour / Phase Fraction		1.0000 *	1.0000	0.0000			
27	Temperature:	(C)	100.0 *	100.0	100.0			
28	Pressure:	(kPa)	101.4	101.4	101.4			
29	Molar Flow	(kgmole/h)	952.9	952.9	0.0000			
30	Mass Flow	(kg/h)	1.717e+004	1.717e+004	0.0000			
31	Std Ideal Liq Vol Flow	(m3/h)	17.20	17.20	0.0000			
32	Molar Enthalpy	(kJ/kgmole)	-2.395e+005	-2.395e+005	-2.795e+005			
33	Molar Entropy	(kJ/kgmole-C)	181.1	181.1	71.29			
34	Heat Flow	(kJ/h)	-2.273e+008	-2.273e+008	0.0000			
35	Liq Vol Flow @Std Cond	(m3/h)	16.92 *	16.92	0.0000			
36					Fluid Package:	Basis-2		
37	Material Stream: 14				Property Package:	QRK		
38								
39	CONDITIONS							
40		Overall	Aqueous Phase					
41								
42	Vapour / Phase Fraction		0.0000	1.0000				
43	Temperature:	(C)	100.0 *	100.0				
44	Pressure:	(kPa)	199.4	199.4				
45	Molar Flow	(kgmole/h)	952.9	952.9				
46	Mass Flow	(kg/h)	1.717e+004	1.717e+004				
47	Std Ideal Liq Vol Flow	(m3/h)	17.20	17.20				
48	Molar Enthalpy	(kJ/kgmole)	-2.795e+005	-2.795e+005				
49	Molar Entropy	(kJ/kgmole-C)	71.29	71.29				
50	Heat Flow	(kJ/h)	-2.664e+008	-2.664e+008				
51	Liq Vol Flow @Std Cond	(m3/h)	16.92 *	16.92				
52					Fluid Package:	Basis-2		
53	Material Stream: 8				Property Package:	QRK		
54								
55	CONDITIONS							
56		Overall	Vapour Phase					
57								
58	Vapour / Phase Fraction		1.0000	1.0000				
59	Temperature:	(C)	220.0 *	220.0				
60	Pressure:	(kPa)	2452 *	2452				
61	Molar Flow	(kgmole/h)	836.1 *	836.1				
62	Mass Flow	(kg/h)	8962	8962				
63	Std Ideal Liq Vol Flow	(m3/h)	25.99	25.99				
64	Molar Enthalpy	(kJ/kgmole)	-3.101e+004	-3.101e+004				
65	Molar Entropy	(kJ/kgmole-C)	128.7	128.7				
66	Heat Flow	(kJ/h)	-2.593e+007	-2.593e+007				
67	Liq Vol Flow @Std Cond	(m3/h)	---	---				
68					Fluid Package:	Basis-2		
69					Property Package:	QRK		
69	Hyprotech Ltd.				HYSYS v3.2 (Build 5029)			
	Licensed to: TEAM LND				Page 3 of 5			
					* Specified by user.			

1			Case Name: C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\IVITORIMEUS\DOCUMENTOS\IMON	
2	 HYPROTECH <small>LIFECYCLE INNOVATION</small>		Unit Set: SI	
3			Date/Time: Sun Nov 30 18:06:36 2008	
4			TEAM LND Calgary, Alberta CANADA	
5				
6	Material Stream: 2		Fluid Package: Basis-2	
7			Property Package: SRK	
8				
9	CONDITIONS			
10		Overall	Vapour Phase	
11	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000	
12	Temperature: (C)	220.0 *	220.0	
13	Pressure: (kPa)	2452	2452	
14	Molar Flow (kgmole/h)	836.5	836.5	
15	Mass Flow (kg/h)	8964	8964	
16	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	26.00	26.00	
17	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-3.101e+004	-3.101e+004	
18	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	128.7	128.7	
19	Heat Flow (kJ/h)	-2.594e+007	-2.594e+007	
20	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	---	---	
21				
22	Material Stream: 7		Fluid Package: Basis-2	
23			Property Package: SRK	
24				
25	CONDITIONS			
26		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase
27	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000	0.0000
28	Temperature: (C)	50.00	50.00	50.00
29	Pressure: (kPa)	1854	1854	1854
30	Molar Flow (kgmole/h)	51.46	51.46	0.0000
31	Mass Flow (kg/h)	647.6	647.6	0.0000
32	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	1.741	1.741	0.0000
33	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-3.939e+004	-3.939e+004	-4.972e+005
34	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	123.6	123.6	931.4
35	Heat Flow (kJ/h)	-2.027e+006	-2.027e+006	0.0000
36	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	---	---	0.0000
37				
38	Material Stream: 9		Fluid Package: Basis-2	
39			Property Package: SRK	
40				
41	CONDITIONS			
42		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase
43	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000	0.0000
44	Temperature: (C)	50.00	50.00	50.00
45	Pressure: (kPa)	1854	1854	1854
46	Molar Flow (kgmole/h)	34.30	34.30	0.0000
47	Mass Flow (kg/h)	431.7	431.7	0.0000
48	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	1.161	1.161	0.0000
49	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-3.939e+004	-3.939e+004	-4.972e+005
50	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	123.6	123.6	931.4
51	Heat Flow (kJ/h)	-1.351e+006	-1.351e+006	0.0000
52	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	---	---	0.0000
53				
54	Material Stream: 10		Fluid Package: Basis-2	
55			Property Package: SRK	
56				
57	CONDITIONS			
58		Overall	Vapour Phase	
59	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000	
60	Temperature: (C)	43.21	43.21	
61	Pressure: (kPa)	2550	2550	
62	Molar Flow (kgmole/h)	836.5	836.5	
63	Mass Flow (kg/h)	8964	8964	
64	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	26.00	26.00	
65	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-3.619e+004	-3.619e+004	
66	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	115.4	115.4	
67	Heat Flow (kJ/h)	-3.027e+007	-3.027e+007	
68				
69	Hyprotech Ltd.		HYSYS v3.2 (Build 5029)	

1	 TEAM LND Calgary, Alberta CANADA		Case Name: C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\IVITORIMEUS\DOCUMENTS\IMON		
2			Unit Set: SI		
3			Date/Time: Sun Nov 30 18:06:36 2008		
4					
5			Fluid Package: Basis-2		
6			Property Package: SRK		
7	Material Stream: 10 (continued)				
8					
9	CONDITIONS				
10		Overall	Vapour Phase		
11					
12	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	---	---		
13					
14	Material Stream: 7A		Fluid Package: Basis-2		
15			Property Package: SRK		
16	CONDITIONS				
17		Overall	Vapour Phase		
18					
19	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000		
20	Temperature: (C)	88.13	88.13		
21	Pressure: (kPa)	2550 *	2550		
22	Molar Flow (kgmole/h)	51.46	51.46		
23	Mass Flow (kg/h)	647.6	647.6		
24	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	1.741	1.741		
25	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-3.818e+004	-3.818e+004		
26	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	124.4	124.4		
27	Heat Flow (kJ/h)	-1.965e+006	-1.965e+006		
28	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	---	---		
29					
30					
31					
32					
33					
34					
35					
36					
37					
38					
39					
40					
41					
42					
43					
44					
45					
46					
47					
48					
49					
50					
51					
52					
53					
54					
55					
56					
57					
58					
59					
60					
61					
62					
63					
64					
65					
66					
67					
68					
69	Hyprotech Ltd.		HYSYS v3.2 (Build 5029)		Page 5 of 5