

مدل سازی ظرف تبخیر ناگهانی هیدروژن در واحد تبدیل کاتالیستی نفتا

سپهر صدیقی^{1*}، سیدرضا سیف محدثی²

¹دکترای مهندسی شیمی (عضو هیئت علمی، استادیار)، پژوهشکده فناوری های کاتالیست، پژوهشگاه صنعت نفت، تهران، ایران
²کارشناسی ارشد مهندسی شیمی (عضو هیئت علمی، مربی)، پژوهشکده فناوری های کاتالیست، پژوهشگاه صنعت نفت، تهران، ایران
 دریافت: 95/4/28 پذیرش: 96/4/24

چکیده

تبدیل کاتالیستی نفتا یکی از واحدهای استراتژیک و اقتصادی برای تبدیل نفتای سنگین به بنزین با اکتان بالا در پالایشگاه است. در این مقاله، مدل سازی ظرف تبخیر ناگهانی که بعد از راکتورهای کاتالیستی قرار داشته و نقش مهمی در بازگردانی هیدروژن به ابتدای فرآیند دارد، مورد بررسی قرار گرفته است. خوراک ورودی به این ظرف بر اساس 26 ترکیب اصلی خروجی از بخش واکنش (شامل هیدروژن، گازهای سبک و هیدروکربنهای پارافینی، نفتنی و آروماتیکی حاوی 5 تا 9 کربن) لامپ شده و محاسبات تبخیر ناگهانی بر اساس معادله ای ترکیبی از پنگ رابینسون و مدل ضریب فعالیت مایع، انجام شده است. سپس نتایج حاصل از مدل سازی با شبیه ساز تجاری اسپن پلاس که در آن از معادله ردلیش کوانک - ان آر تی ال استفاده شده، مقایسه شده اند. نتایج برای غلظت فاز مایع در محدوده دما و فشارهای عملیاتی، خطای متوسط مطلق در حدود 2/7 درصد و برای غلظت گازهای سبک موجود در جریان گازی برگشتی، خطای متوسط مطلق کم تر از 2/08 درصد را نشان می دهد. به علاوه، فشار نقطه شبنم و دبی جریان های خروجی از این مدل، با نتایج به دست آمده از شبیه ساز اسپن پلاس، به ترتیب با خطای متوسط مطلق کم تر از 8 و 0/3 درصد مطابقت می نماید.

کلمات کلیدی: تبدیل کاتالیستی، تبخیر ناگهانی، معادله حالت، مدل ضریب فعالیت

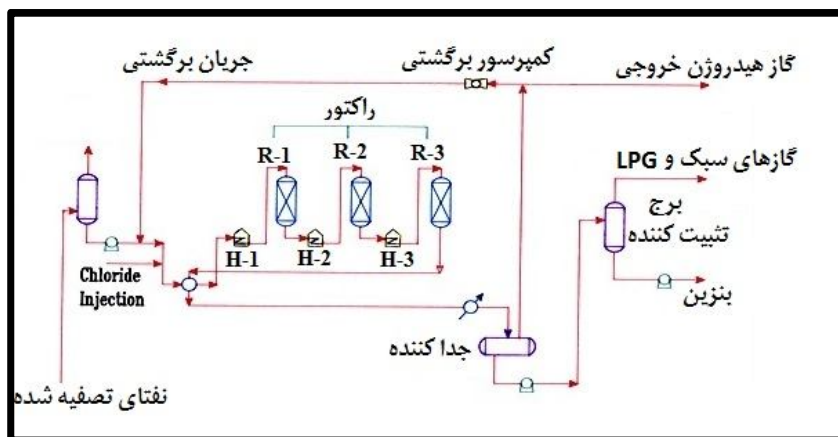
مقدمه

هر سال اتومبیل های جدیدی وارد بازار مصرف می شوند که نیاز به سوخت هایی با عدد اکتان بالا را توجیه می نماید. بنزینی که از تقطیر مستقیم نفت خام به دست آمده عدد اکتان پائینی دارد که لازم است در واحدهای مختلف پالایش، بنزین نامرغوب به محصولی با عدد اکتان بالا تبدیل شود. این عمل در واحد

* Sadighis@ripi.ir

تبدیل کاتالیستی¹ انجام می‌گیرد. امروزه این فرآیند علاوه بر تولید بنزین با عدد اکتان بالا، جهت تولید آروماتیک‌های گران بها نظیر بنزن، تولوئن و زایلن نیز به‌کار می‌رود [1]. فرآیند تبدیل کاتالیستی نقش کلیدی در عملیات پالایشگاهی دارد و برخلاف فرآیندهای دیگر پالایشگاهی از قبیل کراکینگ کاتالیستی، الکیلاسیون، ایزومریزاسیون که در آنها فرآورده‌هایی با عدد اکتان مشخص تولید شده، این فرآیند می‌تواند محصولاتی با عدد اکتان متفاوت تولید نماید.

در این فرآیند، نفتای تصفیه شده (عاری از گوگرد و نیتروژن) به‌عنوان خوراک وارد بخش واکنش می‌گردد (شکل 1). در ابتدا خوراک پس از گرم شدن در کوره اول (H-1) وارد رآکتور اول (R-1) شده که عمده واکنش‌های انجام شده در این رآکتور آروماتیک سازی است. محصول خروجی از این رآکتور وارد کوره دوم (H-2) شده و پس از گرم شدن تا دمای معین، وارد رآکتور دوم (R-2) می‌گردد. به‌دلیل ماهیت گرماگیر بودن عمده واکنش‌های تبدیل کاتالیستی، در ابتدای هر رآکتور کوره‌ای وجود دارد که دمای خوراک را به اندازه مورد نیاز می‌رساند. محصول خروجی از رآکتور دوم مجدداً وارد کوره سوم (H-3) و سپس وارد رآکتور سوم (R-3) می‌شود. بعد از آخرین رآکتور، جداکننده یا محفظه تبخیر ناگهانی² نصب شده که توسط آن بخش عمده‌ای از گازهای سبک خروجی (غنی از هیدروژن) توسط کمپرسور گاز گردشی، به ابتدای فرآیند برگردانده می‌شود. مابقی آن نیز به عنوان گاز جبرانی جهت استفاده به واحدهای تصفیه هیدروژنی نفتا، هیدروکراکینگ و چرخه سوخت گازی پالایشگاه، ارسال می‌گردد. مدل سازی دقیق محفظه تبخیر ناگهانی در واحد تبدیل کاتالیستی از اهمیت به‌سزایی برخوردار است چون همان‌گونه که توضیح داده شد جریان گاز غنی از هیدروژن خروجی از این محفظه، علاوه بر بازگردانی به ابتدای فرآیند، به واحدهای تصفیه هیدروژنی نفتا و هیدروکراکینگ فرستاده می‌شود. ضمناً محصول خروجی از جداکننده پس از عبور از برج تثبیت و جداسازی هیدروکربن‌های سبک از آن (1 تا 4 کربنی)، به‌عنوان بنزین با عدد اکتان بالا به بازار عرضه می‌گردد.



شکل 1. شمای واحد تبدیل کاتالیستی

¹ Catalytic Naphtha Reforming Process

² Flash Drum



در برخی از پژوهش‌ها، فقط مدل‌سازی رآکتور یا صرفاً شبیه‌سازی فرآیند تبدیل کاتالیستی توسط نرم‌افزار تجاری [2 و 3] بررسی شده و در برخی دیگر [7 و 6 و 5 و 4] مدل‌سازی محفظه تبخیر ناگهانی تشریح نشده است. در صورتی که با توجه به اهمیت این محفظه به دلیل جداسازی گازهای سبک و برگشت مجدد آن به رآکتور، بررسی روش‌های مختلف برای مدل‌سازی آن از اهمیت بالایی برخوردار است. در این پژوهش، محفظه تبخیر ناگهانی بر اساس روش لامپینگ ساختاری¹ مدل شده که از دو روش مورد استفاده دیگر در مدل‌سازی فرآیندهای پالایشگاهی (روش لامپینگ پیوسته و ناپیوسته)² دقت بیشتری دارد [8]. سپس برای بیان تعادل فازی بخار-مایع در محفظه تبخیر ناگهانی (محاسبه فشار نقطه شبنم³، نسبت مولی بخار خروجی به خوراک ورودی⁴ و غلظت‌های مولی جریان‌های خروجی مایع و بخار) معادله‌ای ترکیبی ارائه شده است. در این معادله، برای تعادل در فاز گاز از معادله حالت استاندارد پنگ رابینسون⁵ و برای تعادل فاز مایع معادله ضریب فعالیت بر اساس قوانین اختلاط، استفاده شده‌اند. نتایج خروجی از این مدل، در شرایط دمایی و فشاری متفاوت، با نتایج حاصل از نرم‌افزار اسپن پلاس⁶ که در آن از معادله حالت ترکیبی ردلیش کوانک-ان آر تی ال⁷ (پیشنهادی برای شبیه‌سازی مخلوط مواد قطبی و غیرقطبی) [9] استفاده شده، مقایسه می‌گردند.

محاسبات تبخیر ناگهانی

فرآیند جداسازی تک مرحله‌ای واحد تبدیل کاتالیستی (بعد از آخرین رآکتور) فرآیند فلاش یا تبخیر ناگهانی می‌باشد که به صورت ایزوترمال (دما ثابت) انجام می‌شود. دمای این فرآیند، تقریباً با دمای جریان خروجی از سردکن نصب شده بعد از سومین رآکتور، برابر است. شمایی از فرآیند تبخیر ناگهانی در شکل (2) نشان داده شده است.

با موازنه جرم حول محفظه تبخیر ناگهانی، خواهیم داشت [10]:

$$Y_i = \frac{X_{Fi} \times K_i}{1 + RVF(K_i - 1)} \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (1)$$

$$X_i = \frac{X_{Fi}}{1 + RVF(K_i - 1)} \quad (i = 1, 2, \dots, N)$$

¹ Structure-oriented lumping

² Continuous and discrete lumping methods

³ Dew point pressure

⁴ Ratio of vapor to feed (RVF)

⁵ Standard Peng-Robinson (PR) equation of state

⁶ Aspen plus

⁷ Non-random two-liquid & Redlich-Kwong (NRTL-RK)

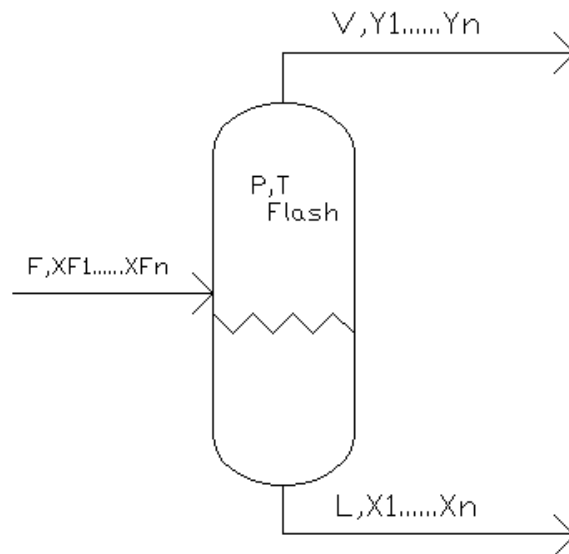
در رابطه (1)، K_i ، ثابت تعادل هر جز $(K\text{-Value})$ ، RVF نسبت مولی بخار خروجی (V) به کل خوراک ورودی (F) ، X_{Fi} جز مولی هر جز در خوراک ورودی، Y_i جزء مولی هر جزء در بخار خروجی و X_i جزء مولی هر جزء در مایع خروجی از ظرف تبخیر ناگهانی می‌باشد.

با توجه به اینکه مجموع جزء مولی ترکیبات موجود در بخار و مایع خروجی یک می‌باشد، خواهیم داشت:

$$\sum \frac{X_{Fi}}{1 + RVF(K_i - 1)} - 1 = 0$$

$$\sum \frac{X_{Fi} \times K_i}{1 + RVF(K_i - 1)} - 1 = 0 \quad (2)$$

$$\sum \frac{X_{Fi}(K_i - 1)}{1 + RVF(K_i - 1)} = 0$$



شکل 2. شمای فرآیند تبخیر ناگهانی دمای ثابت

با توجه به آن که مقدار X_{Fi} (اجزاء مولی خوراک ورودی) مقدار مشخصی است، برای حل معادله (2) به مقادیر K_i نیاز می‌باشد که با توجه به اصول ترمودینامیکی محاسبه می‌گردد (بخش 2-1). معادله (2) به روش آزمون و خطای نیوتن در نرم‌افزار متلب¹، قابل حل می‌باشد. بعد از محاسبه RVF ، با قرار دادن آن در روابط (1)، اجزاء مولی محصولات خروجی به دست خواهند آمد.

¹ Matlab 2012a (Mathworks, Inc.)

محاسبات تعادلی بخار-مایع

رابطه اساسی برای هر جزء در مخلوطی از بخار و مایع به صورت زیر می باشد [11]:

$$f_i^v(T, P, Y_i) = f_i^l(T, P, X_i) \quad (3)$$

که در رابطه فوق :

f_i^v : فوگاسیته هر جزء در فاز بخار

f_i^l : فوگاسیته هر جزء در فاز مایع

برای محاسبه فوگاسیته فاز بخار از معادله حالت و برای محاسبه فوگاسیته فاز مایع از روش ضریب فعالیت مایع¹ به صورت ذیل استفاده می شود:

$$f_i^v = \varphi_i^v Y_i P \quad (4)$$

$$f_i^l = \gamma_i^l X_i f_i \quad (5)$$

در روابط (4) و (5)، P فشار محفظه تبخیر ناگهانی، φ_i^v ، ضریب فوگاسیته هر جزء در فاز بخار، γ_i^l ، ضریب اکتیویته هر جزء در فاز مایع و f_i ، فوگاسیته استاندارد هر جزء در فاز مایع می باشد که به صورت ذیل قابل محاسبه است:

$$f_i = \varphi_i^{Sat} P_i^{Sat} POF_i \quad (6)$$

در رابطه (6)، φ_i^{Sat} ، ضریب فوگاسیته اشباع هر جز، P_i^{Sat} ، فشار اشباع جزئی هر جزء و POF_i ، ضریب پویتینگ² هر جزء می باشد.

با ترکیب روابط (4) و (5) و (6) با رابطه (3)، رابطه اساسی زیر برای محاسبه **K-Value** به دست خواهد آمد:

$$K_i = \frac{Y_i}{X_i} = \frac{\gamma_i^l \varphi_i^{Sat} P_i^{Sat} POF_i}{\varphi_i^v P} \quad (7)$$

در بخش 2-2، نحوه محاسبه هر یک از پارامترهای معادله (7) شرح داده خواهد شد.

روش محاسبه پارامترهای ترمودینامیکی **K-Value**

محاسبه ضریب فوگاسیته فاز بخار (φ_i^v)

برای محاسبه فوگاسیته فاز بخار، از معادله حالت استاندارد پنگ - رابینسون استفاده می شود. نحوه محاسبه و روابط مربوط در مرجع [12] ارائه شده اند.

ضریب اکتیویته فاز مایع (γ_i)

مقدار γ_i ، از معادله چاو - سیدر¹ به صورت زیر محاسبه می گردد [11]:

¹ Liquid activity coefficient method

² Poynting

$$\gamma_i^l = \exp \left[\frac{v_i^l (\delta_i - \bar{\delta}_i)^2}{RT} + \ln \theta_i + 1 - \theta_i \right] \quad (8)$$

در معادله (9)، δ_i ضریب حلالیت می باشد که برای محاسبه آن، می توان از معادله زیر استفاده نمود:

$$\delta_i = \left(\frac{\Delta H_i - RT}{v_i^L} \right)^{1/2} \quad (9)$$

در معادله (9)، ΔH_i حرارت تبخیر جزء مورد نظر می باشد.

در معادلات (8) و (9) v_i^l حجم مولی اجزاء موجود در مایع می باشند. مقادیر θ_i و $\bar{\delta}_i$ در معادله (8) نیز به صورت زیر محاسبه می گردند:

$$\theta_i = \frac{v_i^l}{\sum X_i v_i^l} \quad (10)$$

$$\bar{\delta}_i = \frac{\sum X_i v_i^l \delta_i^l}{\sum X_i v_i^l}$$

ضریب فوگاستیه اشباع (φ_i^{sat})

ضریب فوگاستیه اشباع، از معادله زیر قابل محاسبه است:

$$\varphi_i^{sat} = \exp \frac{B_i P_i^{sat}}{RT} \quad (11)$$

در معادله (11)، B_i ضریب ویریال می باشد که از معادله ابوت² [12] قابل محاسبه است:

$$B = \frac{RT_C}{P_C} \left[0.083 - 0.422/T_r^{1.6} + w(0.139 - 0.172/T_r^{4.2}) \right] \quad (12)$$

در معادله فوق P_C, T_C به ترتیب دما و فشار بحرانی، T_r دمای نقصانی و w ضریب بی مرکزی³ است که از رابطه (13) محاسبه می گردد:

$$w = -1 - \log \left(P_r^{sat} \right)_{T_r=0.7} \quad (13)$$

P_r^{sat} ، فشار اشباع نقصانی در دمای نقصانی (0/7) می باشد.

ضریب پویتینگ (POF)

این ضریب برای هر جزء به صورت زیر محاسبه می گردد:

¹ Chao-Seader

² Abbott

³ Acentric factor



$$POF_i = \exp \left[\frac{-v_i^l (P - P_i^{Sat})}{RT} \right] \quad (14)$$

در رابطه (14)، فشار اشباع جزء مورد نظر و v_i^l ، حجم مولی آن است.

بحث و نتیجه‌گیری

اعتبار سنجی

به منظور اعتبار سنجی نتایج مدل، ابتدا سه وضعیت عملیاتی زیر انتخاب گردیدند:

شرایط عملیاتی (1):

شرایط طراحی است که محفظه تبخیر ناگهانی در این شرایط در حالت پایدار عمل می‌نماید.

شرایط عملیاتی (2):

دمای طراحی ثابت نگه داشته شده، اما فشار عملیاتی پایین‌تر از فشار طراحی فرض می‌شود.

شرایط عملیاتی (3):

دما و فشار در شرایط عملیاتی دور از شرایط طراحی قرار می‌گیرند. این شرایط می‌تواند بر اثر عملکرد نامناسب سردکن نصب شده در بالا دست محفظه تبخیر ناگهانی یا عملکرد نامناسب شیر فشارشکن به وجود آید.

نتایج حاصل از مدل با نتایج حاصل از شبیه‌ساز اسپن پلاس که در آن از معادله ردلیش کوانک-ان آر تی ال استفاده شده، مقایسه شده‌اند. نتایج حاصل از مدل برای شرایط جدول (1) و خوراکی مطابق جدول (2) در جداول (3) تا (8) ارائه شده است.

جدول 1. شرایط دمایی و فشاری جداکننده جهت مقایسه مدل با نتایج اسپن پلاس

شرایط	T(°C)	P (atm)	نتایج
1	37.7	22	جداول (3) و (4)
2	37.7	15	جداول (5) و (6)
3	50	10	جداول (7) و (8)

جدول 2. خوراک ورودی به تبخیر ناگهانی

نشانه ترکیب	نام ترکیب	جز مولی ترکیب
HYDRO-01	هیدروژن	0.84659
METHA-01	متان	0.00678
ETHAN-01	اتان	0.00472
PROPA-01	پروپان	0.00334
N-BUT-02	نرمال بوتان	0.00187
N-PEN-01	نرمال پنتان	0.00129
N-HEX-01	نرمال هگزان	0.00541
3-MET-01	3-متیل پنتان	0.01492
CYCLO-01	سیکلو هگزان	0.00026
METHY-01	متیل سیکلو پنتان	0.00483
BENZE-01	بنزن	0.00401
N-HEP-01	نرمال هپتان	0.01038
3-MET-02	2-متیل هگزان	0.02802
METHY-02	متیل هگزان	0.00087
1,1-D-01	1 و 1 دی متیل سیکلو پنتان	0.00099
TOLUE-01	تولوئن	0.01781
N-OCT-01	نرمال اکتان	0.00804
2,2,4-01	2 و 2 و 4 تری متیل پنتان	0.00895
ETHYL-01	اتیل سیکلو هگزان	0.00112
1-MET-01	1-متیل اتیل سیکلو پنتان	0.00068
ETHYL-02	اتیل بنزن	0.02435
N-NON-01	نرمال نونان	0.00056
3,3-D-01	3 و 3 دی اتیل پنتان	0.00000849
N-PRO-01	نرمال پروپیل سیکلو هگزان	0.0000113
N-BUT-01	نرمال بوتیل سیکلو پنتان	0.0000083
1,2,4-01	1 و 2 و 4 تری متیل بنزن	0.00407

جدول 3. نتایج مدل سازی برای شرایط (1)

	اسپن پلاس	مدل	خطا (%)
فشار شبهم (atm)	0.409	0.415	-1.46
نسبت مولی بخار به خوراک	0.8663	0.8646	0.196



جدول 4. نتایج مدل‌سازی برای شرایط (1)

نشانه ترکیب	اسپن پلاس		مدل		خطا (%)	
	X	Y	X	Y	X	Y
HYDRO-01	0.01200	0.975	0.01310	0.977	-9.14	-0.18
METHA-01	0.00072	0.00772	0.00070	0.00773	3.18	-0.15
ETHAN-01	0.00268	0.00504	0.00272	0.00503	-1.52	0.13
PROPA-01	0.00542	0.00302	0.00561	0.00298	-3.63	1.28
N-BUT-02	0.00670	0.00113	0.0069	0.00107	-4.05	4.80
N-PEN-01	0.00722	Trace	0.00757	Trace	-4.81	-
N-HEX-01	0.03635	Trace	0.03697	Trace	-1.72	-
3-MET-01	0.09804	Trace	0.09816	Trace	-0.13	-
CYCLO-01	0.00184	Trace	0.00185	Trace	-0.72	-
METHY-01	0.03277	Trace	0.03334	Trace	-1.72	-
BENZE-01	0.02760	Trace	0.02775	Trace	-0.56	-
N-HEP-01	0.07477	Trace	0.07488	Trace	-0.15	-
3-MET-02	0.19869	Trace	0.19956	Trace	-0.44	-
METHY-02	0.00633	Trace	0.00631	Trace	0.41	-
1,1-D-01	0.00706	Trace	0.00708	Trace	-0.22	-
TOLUE-01	0.12973	Trace	0.12881	Trace	0.70	-
N-OCT-01	0.05940	Trace	0.05901	Trace	0.66	-
2,2,4-01	0.06418	Trace	0.06415	Trace	0.05	-
ETHYL-01	0.00829	Trace	0.00824	Trace	0.61	-
1-MET-01	0.00502	Trace	0.00498	Trace	0.75	-
ETHYL-02	0.18037	Trace	0.17859	Trace	0.99	-
N-NON-01	0.00420	Trace	0.00416	Trace	0.96	-
3,3-D-01	0.0000631	Trace	0.0000625	Trace	0.90	-
N-PRO-01	0.0000844	Trace	0.0000833	Trace	1.26	-
N-BUT-01	0.0000619	Trace	0.0000612	Trace	1.09	-
1,2,4-01	0.030375	Trace	0.030021	Trace	1.17	-

(X و Y به ترتیب جزء مولی فاز مایع و بخار می‌باشند)

جدول 5. نتایج مدل‌سازی برای شرایط (2)

	اسپن پلاس	مدل	خطا (%)
فشار شبنم (atm)	0.408	0.415	-1.71
نسبت مولی بخار به خوراک	0.8701	0.8687	0.39

جدول 6. نتایج مدل سازی برای شرایط (2)

نشانه ترکیب	اسپن پلاس		مدل		خطا (%)	
	X	Y	X	Y	X	Y
HYDRO-01	0.00817	0.97175	0.00889	0.97326	-8.86	-0.16
METHA-01	0.00049	0.007729	0.00047	0.00773	5.09	-0.02
ETHAN-01	0.0019	0.005151	0.00187	0.00514	1.43	0.03
PROPA-01	0.00404	0.003236	0.00406	0.00322	-0.47	0.33
N-BUT-02	0.00554	0.00133	0.00563	0.0013	-1.69	1.72
N-PEN-01	0.00663	Trace	0.00691	Trace	-4.23	-
N-HEX-01	0.03571	Trace	0.036424	Trace	-1.98	-
3-MET-01	0.09547	Trace	0.094683	Trace	0.83	-
CYCLO-01	0.00183	Trace	0.001858	Trace	-1.13	-
METHY-01	0.03231	Trace	0.033066	Trace	-2.32	-
BENZE-01	0.02736	Trace	0.027603	Trace	-0.89	-
N-HEP-01	0.07565	Trace	0.076063	Trace	-0.54	-
3-MET-02	0.19965	Trace	0.201125	Trace	-0.74	-
METHY-02	0.00642	Trace	0.006411	Trace	0.2	-
1,1-D-01	0.00709	Trace	0.007132	Trace	-0.5	-
TOLUE-01	0.13196	Trace	0.131248	Trace	0.54	-
N-OCT-01	0.06077	Trace	0.060581	Trace	0.32	-
2,2,4-01	0.0648	Trace	0.064857	Trace	-0.07	-
ETHYL-01	0.00848	Trace	0.008467	Trace	0.23	-
1-MET-01	0.00513	Trace	0.005105	Trace	0.49	-
ETHYL-02	0.1848	Trace	0.183411	Trace	0.75	-
N-NON-01	0.00431	Trace	0.004289	Trace	0.65	-
3,3-D-01	0.00000647	Trace	0.00000643	Trace	0.63	-
N-PRO-01	0.0000866	Trace	0.0000858	Trace	0.92	-
N-BUT-01	0.0000636	Trace	0.0000631	Trace	0.81	-
1,2,4-01	0.03122	Trace	0.03093	Trace	0.93	-

(X و Y به ترتیب جزء مولی فاز مایع و بخار می باشند)

جدول 7. نتایج مدل سازی برای شرایط (3)

	اسپن پلاس	مدل	خطا (%)
فشار شبنم (atm)	0.742	0.751	-1.21
نسبت مولی بخار به خوراک	0.8831	0.8816	0.17



جدول 8. نتایج مدل سازی برای شرایط (3)

نشانه ترکیب	اسپن پلاس		مدل		خطا (%)	
	X	Y	X	Y	X	Y
HYDRO-01	0.00562	0.9579	0.00572	0.9597	-1.76	-0.19
METHA-01	0.00031	0.00764	0.00027	0.00759	11.91	0.67
ETHAN-01	0.00109	0.00521	0.00102	0.00517	6.34	0.67
PROPA-01	0.0023	0.00347	0.00223	0.00345	3.17	0.61
N-BUT-02	0.00346	0.00166	0.00341	0.00165	1.43	0.59
N-PEN-01	0.00496	Trace	0.00514	Trace	-3.5	-
N-HEX-01	0.03232	Trace	0.033377	Trace	-3.25	-
3-MET-01	0.08401	Trace	0.080795	Trace	3.83	-
CYCLO-01	0.00175	Trace	0.001802	Trace	-2.6	-
METHY-01	0.0297	Trace	0.031107	Trace	-4.71	-
BENZE-01	0.02564	Trace	0.026177	Trace	-2.08	-
N-HEP-01	0.07676	Trace	0.07818	Trace	-1.84	-
3-MET-02	0.19678	Trace	0.200019	Trace	-1.64	-
METHY-02	0.00659	Trace	0.006608	Trace	-0.22	-
1,1-D-01	0.00699	Trace	0.007097	Trace	-1.54	-
TOLUE-01	0.13752	Trace	0.136969	Trace	0.4	-
N-OCT-01	0.0651	Trace	0.065448	Trace	-0.53	-
2,2,4-01	0.06533	Trace	0.065369	Trace	-0.05	-
ETHYL-01	0.0091	Trace	0.009168	Trace	-0.67	-
1-MET-01	0.00546	Trace	0.005467	Trace	0	-
ETHYL-02	0.19977	Trace	0.198667	Trace	0.56	-
N-NON-01	0.00472	Trace	0.00472	Trace	0.13	-
3,3-D-01	0.00000706	Trace	0.00000704	Trace	0.26	-
N-PRO-01	0.0000947	Trace	0.0000945	Trace	0.28	-
N-BUT-01	0.0000698	Trace	0.0000694	Trace	0.48	-
1,2,4-01	0.03444	Trace	0.03413	Trace	0.9	-

(X و Y به ترتیب جزء مولی فاز مایع و بخار می باشند)

آنالیز حساسیت

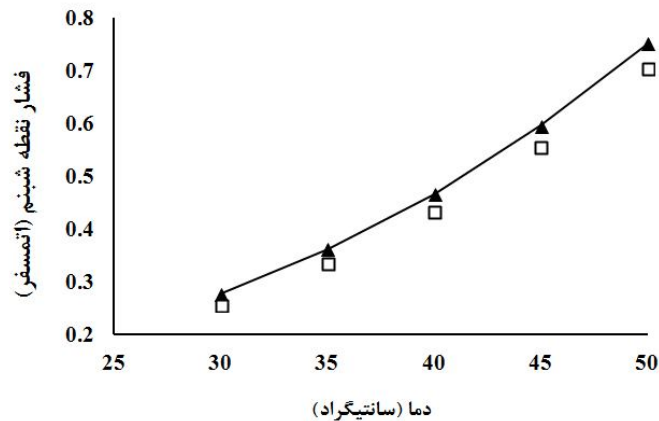
به منظور بررسی دقت و اعتبار مدل در محدوده دما و فشارهای عملیاتی، آنالیز حساسیت مدل در دما (30 تا 50 درجه سانتیگراد) و فشار (10 تا 22 اتمسفر) انجام گرفت. با توجه به انتخاب نقاط مختلف دمایی و فشاری در محدوده کاری فرآیند تبخیر ناگهانی فرآیند تبدیل کاتالیستی نفتا (در شرایط عادی و سخت)، می‌توان از دقت مدل اطمینان حاصل نمود.

در جدول (9) خطای پیش‌بینی اجزای مولی فاز بخار (Y) و مایع (X) حاصل از تبخیر ناگهانی در مقایسه با نتایج اسپن پلاس ارائه شده است. از این جدول می‌توان نتیجه گرفت که مدل بخوبی اجزای موجود در فاز بخار و مایع را پیش‌بینی نموده، به‌طوری‌که خطای متوسط مطلق اجزای مولی ترکیبات در فاز بخار و مایع در مقایسه با شبیه‌ساز اسپن پلاس به ترتیب 2/08 و 2/69 درصد می‌باشند.

جدول 9. آنالیز حساسیت خطای جز مولی بخار و مایع در فشار و دماهای مختلف

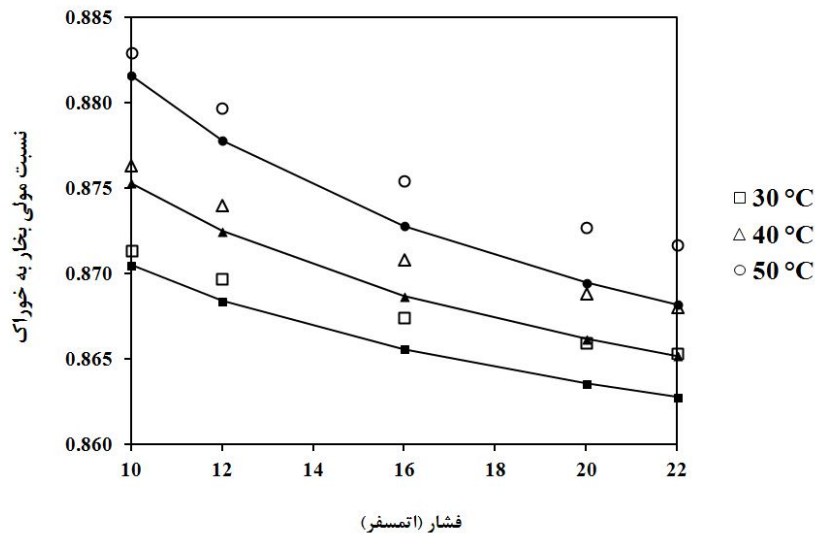
شرایط عملیاتی		خطا (%)	
T (°C)	P (atm)	X	Y
30	10	1/69	2/79
40	10	3/95	1/89
50	10	7/65	0/67
30	12	0/94	2/57
40	12	2/55	1/80
50	12	5/68	1/10
30	16	2/03	1/83
40	16	1/08	1/48
50	16	3/82	1/67
30	20	2/08	1/90
40	20	1/42	2/40
50	20	1/76	2/58
30	22	2/38	2/50
40	22	1/86	2/97
50	22	1/47	3/12
خطای متوسط (%)		2/69	2/08

در شکل (3)، فشار نقطه شبنم محاسبه شده توسط مدل با نتایج حاصل از شبیه‌ساز اسپن پلاس مقایسه شده‌اند. این شکل به‌خوبی نشان می‌دهد که مدل ارائه شده توانسته فشار نقطه شبنم را در محدوده دمایی 30 تا 50 درجه سانتیگراد با دقت خوبی پیش‌بینی نماید. خطای متوسط مطلق پیش‌بینی مدل برای این نقاط در مقایسه با اسپن پلاس، 7/84 درصد بوده است.



شکل 3. مقایسه فشار نقطه شبنم حاصل از مدل (▲) در دماهای مختلف در مقایسه با نتایج اسپن پلاس (□)

در شکل (4) در دما و فشارهای جدول (9)، نسبت بخار به خوراک تخمینی توسط مدل با شبیه‌ساز اسپن پلاس مقایسه شده است. این شکل نشان می‌دهد که مدل ترمودینامیکی ارائه شده این متغیر را در دما و فشارهای مختلف، بخوبی پیش‌بینی نموده به طوری که خطای متوسط مطلق آن در این محدوده عملیاتی 0/23 درصد است. با توجه به حساسیت مدل در برابر تغییرات دما و فشار و دقت قابل قبول آن برای محاسبه اجزای مولی بخار و مایع حاصل از تبخیر ناگهانی، فشار نقطه شبنم و نسبت بخار به خوراک، می‌توان نتیجه گرفت که مدل ارائه شده برای مدل‌سازی فرآیند تبخیر ناگهانی واحد تبدیل کاتالیستی نفتا در محدوده فشار و دمای کاری، معتبر است.



شکل 4. مقایسه نسبت مولی بخار به خوراک حاصل از مدل (● و ▲ و ■) در دماهای مختلف در مقایسه با نتایج اسپن پلاس (□، △ و ○)

نتیجه‌گیری

در این تحقیق، جداساز تک مرحله‌ای یا محفظه تبخیر ناگهانی واحد تبدیل کاتالیستی که بعد از آخرین راکتور کاتالیستی قرار دارد، مورد مدل‌سازی قرار گرفت. نتایج برای غلظت فاز مایع در فشارهای 22، 15 و 10 اتمسفر و دماهای 37/7 و 50 درجه سانتی‌گراد، خطای متوسط مطلق کم‌تر از 3 درصد و برای غلظت گازهای سبک موجود در جریان گازی برگشتی، خطای متوسط مطلق کم‌تر از 5 درصد را نشان می‌دهد. به‌علاوه، فشار نقطه شبنم و دبی جریان‌های خروجی از این مدل، با نتایج به‌دست آمده از شبیه‌ساز اسپن پلاس، با خطای متوسط مطلق کم‌تر از 1/5 درصد مطابقت می‌نماید.

نتایج حاصل از مدل‌سازی (فشار نقطه شبنم، نسبت بخار به مایع و جز مولی ترکیبات در مایع و بخار در تبخیر ناگهانی) با نتایج حاصل از شبیه‌ساز تجاری اسپن پلاس در محدوده فشار عملیاتی 10 تا 22 اتمسفر و دمای 30 تا 50 درجه سانتی‌گراد، نشان می‌دهد که برای محدوده شرایط فشاری و دمایی فوق، برای محاسبه غلظت مولی اجزای موجود در بخار و مایع خروجی از محفظه تبخیر ناگهانی، فشار نقطه شبنم و نسبت بخار به خوراک، مدل به ترتیب در حدود 2/08، 2/69 و 7/84 و 0/3 درصد در مقایسه با اسپن پلاس خطا داشته است. در نتیجه از آن می‌توان با دقت و اطمینان قابل قبول برای بهینه‌سازی و رفع گلوگاه‌های این واحد، بهره برد. به‌علاوه این مدل می‌تواند در فرآیندهای تبخیر ناگهانی در نرم‌افزارهایی که به منظور شبیه‌سازی واحدهای تبدیل کاتالیستی یا دیگر فرآیندهای پالایشگاهی که در داخل کشور تهیه شده، به‌کار برده شود.

منابع

1. Antos G.J., Aitani A.M., Parera J. M., Catalytic Naphtha reforming Science and Technology, Marcel Dekker Inc., New York, 2004.
2. Rodríguez M. A., Ancheyta J., Detailed description of kinetic and reactor modeling for naphtha catalytic reforming, Fuel, Volume 90, Issue 12, December 2011, pp 3492–3508.
- 3- سپهر صدیقی، سید رضا سیف محدثی، فرید ریخته‌گر، «شبیه‌سازی واحد تبدیل کاتالیستی نفتای سنگین توسط نرم‌افزار Aspen plus». فرآیندنو، شماره 42، تابستان 1392.
4. Liang K., Guo H., Pan S., A study on naphtha catalytic reforming reactor simulation and analysis, Zhejiang Univ Sci B., 6(6), 2005, pp 590–596.
5. Hu Y., Su H., Chu J., Modeling, simulation and optimization of commercial naphtha catalytic reforming process, 42nd IEEE Conference, 2003, pp 6206 – 6211
6. Arani H.M. Shokri S., Shirvani M., Dynamic Modeling and Simulation of Catalytic Naphtha Reforming, International Journal of Chemical Engineering and Applications, Vol. 1, 2010, pp 159-164.
7. Saidi M., Mostoufi N., Sotoudeh R. Modeling and simulation of continuous Catalytic Regeneration (CCR) Process, International Journal of Applied Engineering Research, Dindigul, Vol. 2, 1, 2011, pp 11-124 .
8. Ancheyta J., Modeling and Simulation of Catalytic Reactors for Petroleum Refining, John Wiley & Sons, Inc., US, 2011.
9. Aspen Physical Property System, Physical Property Methods and Models, October 2006, Aspen Technology, Inc., USA.



10. Smith J.M., Van Ness H.C., Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics, McGraw-Hill, Fifth Edition, 1996.
11. Prausnitz J.M., Lichtenthaler R.N., Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria, Prentice Hall PTR, Third Edition, 1998.
12. Walas S.M., Phase Equilibria in Chemical Engineering, Department of Chemical and Petroleum Engineering, University of Kansas, 1991.
13. Michelsen M.L., the Isothermal Flash Problem. Part I. Stability, Elsevier Scientific Publishing Company, Fluid Phase Equilibria, 9, 1982, pp 1-19.