

## شبیه‌سازی فرایند تولید متانول و تعیین شرایط بهینه فرایندی

ماشاءالله رضا کاظمی، محمدرضا دهقانی\*، میثم حاجی لری

تهران، دانشگاه علم و صنعت ایران، دانشکده مهندسی شیمی

پیام‌نگار: m\_dehghani@iust.ac.ir

### چکیده

متانول از مهمترین محصولات پتروشیمی می‌باشد که در سطح گسترده‌ای در دنیا تولید می‌شود، و نقش عمده‌ای در تولید سایر محصولات شیمیایی دارد. امروزه سعی می‌شود از متانول به طور وسیعی به عنوان خوراک واحدهای اولفین برای تولید سوخت استفاده شود. شبیه‌سازی، ابزاری توانمند در شناخت پارامترهای اصلی و مؤثر فرایند مطرح است. در این مقاله فرایند تولید متانول تحت لیسانس شرکت دیوی-مکی، و با استفاده از نرم‌افزار هایسیس، در حالت پایا، شبیه‌سازی شده و نتایج آن با داده‌های واقعی فرایند مقایسه گردیده و گزارش شده است. پس از اطمینان از صحت شبیه‌سازی، شرایط بهینه عملکردی فرایند به‌منظور کاهش گازهای گلخانه‌ای و همچنین کاهش مصرف انرژی مورد بررسی قرار گرفته است.

کلمات کلیدی: متانول، دیوی مکی، شبیه‌سازی، بهینه‌سازی

### ۱- مقدمه

متانول یک سوخت الکلی است که امروزه قسمت عمده تولید آن در سطح جهان طی فرایندی با استفاده از گاز طبیعی تولید می‌شود. اگر چه از دیگر مواد مانند نفت خام، گازولین (بنزین) و بوتان، نیز متانول تولید می‌شود، لیکن به لحاظ اقتصادی استفاده از گاز طبیعی مقرون به صرفه است. امروزه سعی می‌شود از متانول به طور وسیعی به عنوان خوراک واحد اولفین پتروشیمی استفاده شود. از طرف دیگر در طی فرایند اولفین، مقدار زیادی متانول تولید می‌شود که به عنوان خوراک واحد اولفین می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد.

متانول یکی از مهمترین محصولات پتروشیمی است که در تولید بسیاری از محصولات و کالاها مورد استفاده قرار می‌گیرد. متانول، به‌طور عمده در تولید فرمالدهیدها، متیل ترشیو بوتیل اتر، اسیدها، رنگ‌ها و حلال‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرد.

مشتقات متانول در پنج گروه کلی تقسیم‌بندی می‌شوند که در

جدول (۱) اسامی آن‌ها و درصد تقریبی تخصیص متانول به آن‌ها آورده شده است [۱].

جدول ۱- مشتقات متانول و درصد تبدیل

نام محصول	متیل آمین و کلرومتان	حلال‌ها	اسید استیک	متیل ترشیو بوتیل اتر	فرمالدهید
درصد	۲۲	۸	۸	۲۷	۳۵

همان طور که در جدول (۱) مشاهده می‌شود، قسمت اعظم متانول تولیدی در جهان صرف تولید فرمالدهیدها و متیل ترشیو بوتیل اتر می‌شود. همچنین متانول به عنوان یکی از محصولات راهبردی در تولید بسیاری از محصولات نهایی مانند حلال‌ها، رنگ‌ها، پلاستیک‌ها و ضدیخ‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرد. تنوع مشتقات متانول و

(۲) قابلیت خالص‌سازی متانول تا ۹۹/۷۳ درصد مولی  
 (۳) بهره‌وری گرمایی سیستم، بالاست. استفاده از تکنولوژی پینچ<sup>۵</sup> و انتقال گرما از سیال گرم به سرد با توجه به قوانین ترمودینامیکی در این فرایند به راحتی قابل انجام است.

(۴) استفاده از فرایند ریفرمینگ اتوترمال<sup>۶</sup> برای تولید گاز سنتز عملیات اصلی و مهم در فرایند تولید متانول عبارتند از:

(۱) آماده‌سازی و خالص‌سازی خوراک

(۲) واکنش‌های تبدیل گاز طبیعی

(۳) سنتز متانول

(۴) خالص‌سازی متانول

نمای ساده‌ای از فرایند سنتز متانول در شکل (۱) نشان داده شده است.

در جدول (۲) فرایندهای شناخته شده‌ای که عمدتاً از آنها برای تولید متانول در جهان استفاده شده ارائه گردیده است. از بین شرکت‌های بزرگی مانند هالدر تاپسو، لورگی، توپو و اوده مشاهده می‌شود که واحد متانول دیوی مک کی به دلیل قابلیت تغییر ظرفیت و داشتن توجه اقتصادی و همچنین مصرف کمتر انرژی، مقرون به صرفه‌تر است.

### ۳- شرح مختصر فرایند

جریان خوراک ابتدا وارد واحد گوگردزدایی می‌شود. درصنعت از این واحد برای حذف ترکیبات احتمالی گوگردی موجود در جریان خوراک استفاده می‌شود. این واحد، دارای بستری شامل دو بخش است، در بستر اول، ترکیبات گوگردی توسط کبالت مولیبدیوم به هیدروژن سولفید تبدیل می‌شود و سپس در بستر دوم که شامل اکسید روی است، هیدروژن سولفید به سولفیدروی تبدیل می‌گردد. فرایند گوگردزدایی گرم‌مازاست و از گرمای حاصل از آن برای گرم کردن جریان خوراک استفاده می‌شود.

استفاده از آن در صنایع مختلف، این محصول را به عنوان یک کالای راهبردی مطرح ساخته است و ضمناً این لحاظ نوسان قیمت آن بر بسیاری از صنایع تولیدی اثر می‌گذارد. در کنار موارد فوق در سال‌های آینده بخش عظیمی از متانول تولیدی در فرایندهای تولید اولفین<sup>۱</sup> و همچنین جهت تولید سوخت<sup>۲</sup> به‌کار خواهد رفت، بنابراین رشد مصرف و تولید متانول در سال‌های آینده با توجه به کاهش تولید نفت و افزایش استحصال گاز، فرایند خواهد بود. در صنایع پتروشیمی، خصوصاً در خاورمیانه به دلیل وجود تولیدکنندگان متعدد و رقابت نزدیک کشورهای تولیدکننده مواد پایه، استفاده از تکنولوژی‌های نوین بسیار به صرفه خواهد بود. کشور اسلامی ما ایران، با توسعه طرح‌های بزرگ تولید متانول، با تبدیل گاز طبیعی به متانول ارزش آنرا چند برابر افزایش می‌دهد. ایران چهار کارخانه بزرگ تولید متانول و دو کارخانه دیگر در دست ساخت دارد که ظرفیت ایران را ۶۰ درصد افزایش می‌دهد. موارد فوق، اهمیت بررسی فرایند متانول را نشان می‌دهد، لذا در این مقاله ضمن بررسی و شبیه‌سازی فرایند دیوی-مکی<sup>۳</sup>، زمینه‌های بهینه‌سازی این فرایند مورد مطالعه قرار گرفته است.

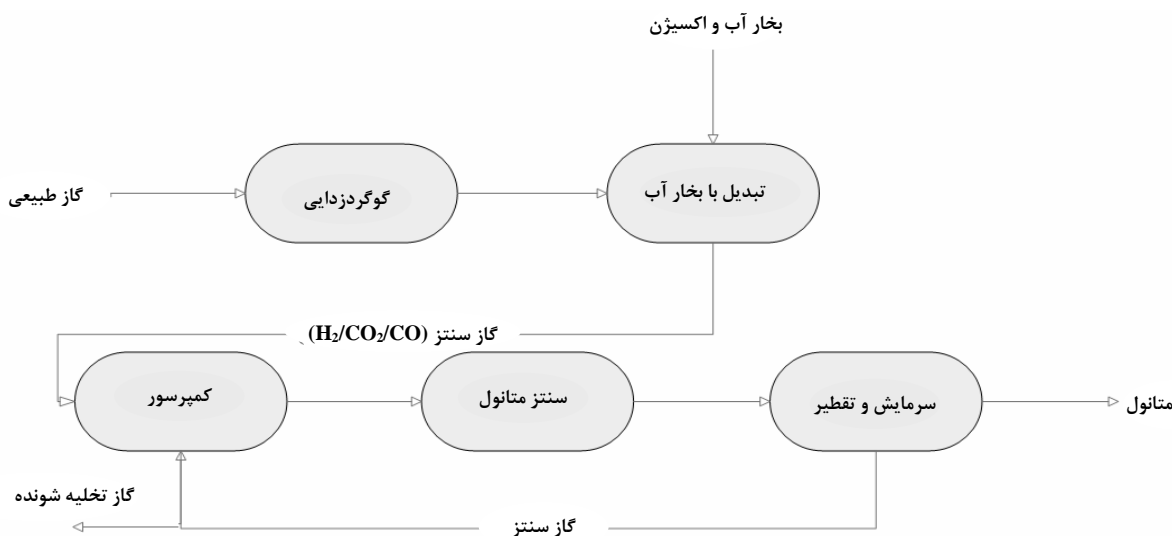
### ۲- شبیه‌سازی و اهداف آن

هدف از شبیه‌سازی فرایندهای شیمیایی، برقراری ارتباط بین پارامترهای موثر در یک فرایند به منظور پیش‌بینی و بهینه‌سازی رفتار و عملکرد آن فرایند است. در یک واحد، بعد از شبیه‌سازی می‌توان با تغییر شرایط فیزیکی خوراک، مانند دما، فشار، شدت و مقدار شدت جریان خوراک ورودی و ترکیب درصد اجزاء (غلظت خوراک) و همچنین تغییر ابعاد دستگاه‌های فرایندی و تاثیر آن‌ها بر نتیجه فرایند (درصد تبدیل) را به دست آورد [۲].  
 فرایند دیوی-مکی به‌دلیل استفاده از گاز سنتز در مجاورت کاتالیزگر، تحت فشار مناسب، از روش‌های مدرن تولید متانول، محسوب می‌شود [۱]. از مشخصه‌های مهم فرایند تولید متانول، می‌توان به موارد زیر اشاره کرد:

(۱) استفاده از راکتور از نوع بخار بالا رونده<sup>۴</sup> فشار ضعیف

1. Methanol to Olefin
2. Methanol to Gasoline
3. Davy-Mckee
4. Steam Raising

5. Pinch
6. Auto Thermal Reforming (ATR)



شکل ۱- نمای ساده‌ای از فرایند سنتز متانول

جدول ۲- مجوزهای مختلف تولید متانول [۱]

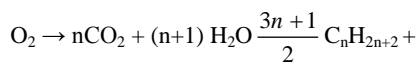
هالدر تاپسو <sup>۱</sup>	لورگی <sup>۲</sup>	تویو <sup>۳</sup>	Uhde GmbH	دیوی مک کی	
۷/۲ گیگا کالری	۳۰ گیگا ژول	۳۰ گیگا ژول	۸ گیگا کالری	۷ گیگا کالری	انرژی مورد نیاز (به ازای تولید یک تن متانول)
۲۵۰۰ الی ۳۰۰۰	۵۰۰۰	۵۰۰۰ الی ۷۰۰۰	۱۲۵۰	۵۰۰۰	ظرفیت (متریک تن در روز)
۱ واحد ۳۰۰۰ تنی در ایران و دو واحد در مقیاس ۳۰۰۰ تنی در دست ساخت	۳۵	۲۰	۱۱	۳۰ واحد با ظرفیت ۳ هزار تن و ۵۰ واحد در اندازه‌های کوچکتر و ۲ واحد ۵۰۰۰ تنی	تعداد واحدهای ساخته شده در جهان

اتوترمال برای تولید گاز سنتز استفاده می‌شود. جریان خروجی از ریفرمر عمدتاً شامل هیدروژن، دی‌اکسید کربن و بخار آب است به طوری که دمای آن به  $1616^{\circ}\text{F}$  می‌رسد. از این گرما برای تولید بخار ابرگرم و نیز پیش گرمایش جریان خوراک ورودی استفاده می‌شود، از بخشی از بخار تولید شده نیز برای رقیق کردن خوراک ورودی به کوره استفاده می‌شود. در نهایت، جریان خروجی از کوره پس از چندین مرحله تبادل گرما، به دمای  $104^{\circ}\text{F}$  می‌رسد و

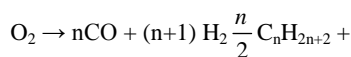
جریانی که گوگرد آن زدوده شده در تماس دهنده (گاز-مایع) توسط جریان آب برگشتی از بخار آب، اشباع می‌شود. دمای خوراک اشباع شده با تبادل گرمایی با جریان خروجی از کوره، به  $500^{\circ}\text{F}$  رسانده می‌شود. برای ایجاد نسبت استوکیومتری از متان و بخار آب، به جریان خوراک، بخار آب تزریق می‌شود. در این فرایند از ریفرمر

1. Haldor Topsoe
2. Lurgi
3. Toyo Engineering Corp

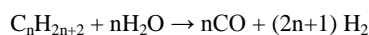
اکسایش کلی



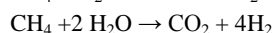
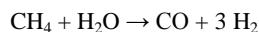
اکسایش جزئی



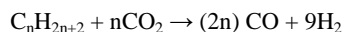
تبدیل با بخار<sup>۳</sup>



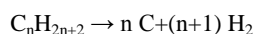
تبدیل با بخار متان



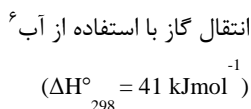
تبدیل دی اکسیدکربن<sup>۴</sup>



واکنش شکست<sup>۵</sup>



واکنش‌هایی که گاز سنتز در آنها نقش دارد:



متاناسیون<sup>۷</sup>



بودوارد<sup>۸</sup>



کربن زدایی<sup>۹</sup>



سپس وارد جداکننده دوفازی می‌شود. گازهای جدا شده که اکثراً گاز سنتز می‌باشند به راکتور سنتز متانول فرستاده می‌شوند. با توجه به فشار عملیاتی راکتور قبل از ورود به راکتور، فشار گازها طی دومرحله عبور از کمپرسور به ۱۱۷۲ psig رسانده می‌شود. کمپرسور به کار گرفته شده در این فرایند از نوع کمپرسور گریز از مرکز است که به وسیله توربین به حرکت در می‌آید. جریان خروجی از اولین مرحله کمپرسور، خنک می‌گردد و مایعات احتمالی ایجاد شده در طی فرایند سرمایش جدا می‌شوند. برای تنظیم دمای خروجی هر مرحله، از آب خنک‌کننده استفاده می‌شود. جریان خروجی از کمپرسور با جریانی از دی‌اکسیدکربن و جریان برگشتی از گازهای واکنش نکرده مخلوط شده و وارد راکتور می‌شود. واکنش تبدیل گازسنتز به متانول، گرمازا است و از این گرما برای انجام واکنش استفاده می‌شود. در زمان راه‌اندازی واحد چون هنوز هیچ واکنش گرمازایی انجام نشده که از گرمای آن برای ادامه انجام واکنش استفاده شود قبل از ورود به راکتور، جریان از یک تبادلاگر عبور می‌کند تا گرمای اولین واکنش را فراهم نماید. بعد از پایدار شدن فرایند، این تبادلاگر از چرخه خارج می‌شود. راکتور استفاده شده در این فرایند به صورت یک تبادلاگر پوسته و لوله است. خوراک، وارد پوسته راکتور شده توسط گرمای آزاد شده از لوله‌ها پیش‌گرم می‌شود و سپس وارد لوله‌های راکتور می‌گردد و گاز سنتز به متانول تبدیل می‌شود. جریان خروجی از راکتور بعد از خنک شدن وارد جداکننده دو فازی می‌شود. گازهای واکنش نکرده بعد از رسیدن به شرایط دمایی و فشاری، دوباره به راکتور بازگردانده می‌شوند و مقداری از آنها به عنوان مواد زاید<sup>۱</sup> از سیستم خارج می‌شود تا در سیستم تجمع پیدا نکند. به متانول حاصل از واکنش، کاستیک دوزینک<sup>۲</sup> (سود) زده می‌شود تا PH آن برای ورود به برج سینی‌دار تنظیم گردد. محصولات خروجی از برج واحد متانول شامل متانول با خلوص ۹۹/۷۳ درصد با شدت جریان ۶۱۴/۵۲ پوند مول بر ساعت است.

#### ۴- واکنش‌های کلی

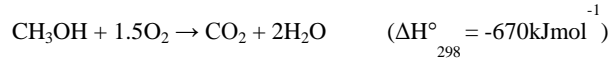
برای یک هیدروکربن واکنش‌های کلی زیر اتفاق می‌افتد [۳]:

1. Purge
2. Caustic Dosing

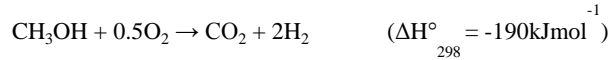
3. Steam Reforming
4. CO<sub>2</sub> Reforming
5. Cracking
6. Water-Gas Shift
7. Methanation
8. Boudouard
9. Carbon Gasification

واکنش‌های متانول [۳]:

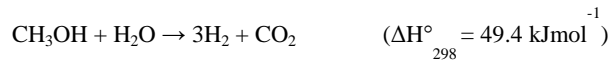
اکسایش کلی



اکسایش جزئی



تبدیل متانول با بخار



تجزیه متانول



واکنش‌های ترکیب دی اکسید کربن با هیدروژن و واکنش متاناسیون محدود به مقدار مونوکسید کربن و دی اکسید کربن موجود در گاز سنتز و علاوه بر این، محدود به دمای واکنش ( $400^\circ\text{C}$ ) می‌باشند به نحوی که در دماهای کمتر از این دما، شدت واکنش متاناسیون کم و حتی قابل نظر کردن (با توجه به کاتالیزگر به کار رفته در فرایند) است. معمولاً معادله سینتیکی که میزان تبدیل مونوکسید کربن به متانول را نشان می‌دهد به شکل زیر ارائه می‌شود [۵]:

$$D = \frac{P_{\text{CO}} \cdot P_{\text{H}_2}^2 - \frac{P_{\text{CH}_3\text{OH}}}{K_p}}{(A + B \cdot P_{\text{CO}} + C \cdot P_{\text{H}_2} + D \cdot P_{\text{CH}_3\text{OH}})^3}$$

ثابت‌های A، B، C و D با توجه به نوع کاتالیزگر تعیین می‌شوند. تجزیه و تحلیل معادله نشان می‌دهد که می‌توان با تغییر دما در راکتور به بالاترین میزان تبدیل رسید. براساس نتایج تجربی منتشر شده توسط باوکوت<sup>۱</sup> شرایط دستیابی به تعادل برای تبدیل مونوکسید کربن و دی اکسید کربن در فشار ۵۰۰۰ کیلوپاسکال و کاتالیزگر اکسید مس، به ترتیب، ۱۲ و ۷ درجه سلسیوس است [۵].

## ۵- شبیه‌سازی با استفاده از نرم‌افزار هایسیس

در این بخش با توجه به اطلاعات موجود، شبیه‌سازی کل فرایند انجام شده است. قبل از ورود به محیط شبیه‌سازی، موارد زیر بایستی اجرا شوند:

- (۱) تعریف مواد موجود در فرایند
- (۲) تعریف یک معادله حالت مناسب که با مواد انتخابی تطابق داشته باشد. این مطلب با توجه به اطلاعات ترمودینامیکی موجود در بخش معادلات حالت انجام می‌شود.
- (۳) تعریف واکنش یا واکنش‌های مربوطه، در بخش واکنش به علت وجود راکتور سنتز در این فرایند

واکنش‌های سنتز متانول در حضور کاتالیزگر انجام می‌شود و معمولاً دو نوع کاتالیزگر در صنعت سنتز متانول وجود دارد [۴]:

۱- کاتالیزگری که شامل مخلوط همگنی از کروم و اکسید روی است که در این حالت، شرایط دمایی و فشاری آن  $400^\circ\text{C}$  - ۳۰۰ و ۳۵۰۰۰ - ۳۰۰۰۰ کیلوپاسکال می‌باشد، که تا سال ۱۹۶۰ از این کاتالیزگر استفاده می‌شد.

۲- کاتالیزگر مس دارای دما و فشار عملیاتی  $270^\circ\text{C}$  - ۲۴۰ و ۱۰۰۰۰ - ۵۰۰۰ کیلوپاسکال می‌باشد که در این حالت عمر کاتالیزگر سه سال است.

راکتور سنتز متانول گلوگاه اصلی در راه تولید بیشتر است. از عوامل مؤثر بر افزایش میزان تولید متانول می‌توان به موارد زیر اشاره کرد

- ۱- افزایش فشار
  - ۲- کاهش دما
  - ۳- افزایش نسبت مونوکسید کربن و دی اکسید کربن در گاز سنتز
  - ۴- افزایش مقدار هیدروژن در خوراک ورودی به راکتور
- به منظور دستیابی به حداکثر تبدیل مونوکسید کربن و دی اکسید کربن به متانول، «بازدهی کربن» به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\text{بازدهی کربن} = \frac{\text{تعداد مول های متانول تولید شده}}{\text{تعداد مول های } (\text{CO}_2 + \text{CO})}$$

## ۶- فرضیات شبیه‌سازی در هایسیس

مطابق اطلاعات موجود در نقشه فرایندی، مواد حاضر در فرایند تعریف می‌شوند. ترکیب گاز ورودی به واحد متانول در جدول (۳) آورده شده که قسمت اعظم خوراک را هیدروکربن تشکیل داده است. شبیه‌سازی همراه با فرضیاتی بوده است که در ادامه به آن‌ها پرداخته می‌شود.

۱. در بخش معادلات حالت، تا قبل از راکتور سنتز متانول، از معادله حالت PRSV استفاده شده است. اما بعد از راکتور به دلیل حضور آب و متانول در جریان از COM Thermo استفاده شده به نحوی که برای فاز بخار معادله PRSV و برای فاز مایع معادله حالت NRTL تعریف شده است [۶،۷].

۲. افت فشار در همه‌ی فلش درام‌ها و تبادله‌های گرمایی با توجه به اطلاعات نقشه‌های فرایندی و فشار جریان‌ها در نظر گرفته شده است.

۳. گاز اشباع خروجی از واحد گوگردزایی حاوی مقادیر بسیار کمی از الکل‌های سنگین است. برای در نظر گرفتن این‌گونه مواد در جریان، از قسمت تعریف مواد شبه فرضی<sup>۱</sup> استفاده شده است. جرم مولکولی و نقطه جوش عادی چنین موادی، به ترتیب، ۷۲/۴ و  $210^{\circ}\text{C}$  در نظر گرفته شده است تا جرم مولکولی، چگالی و گرانشی جریان، مطابق نقشه‌های فرایندی شود.

۴. تمامی کمپرسورها در حالت عملیاتی آدیاباتیک با بازدهی ۷۵٪ منظور شده‌اند.

۵. ادواتی مانند صافی‌های جداسازی مواد جامد که تاثیری در نتایج شبیه‌سازی ندارند در شبیه‌سازی آورده نشده‌اند.

۶. در بخش واکنش‌ها واکنش مربوطه مطابق بخش ۳ تعریف شده‌اند.

بعد از انجام این مراحل وارد محیط شبیه‌سازی شده و شبیه‌سازی فرایند بر اساس نقشه‌های فرایندی انجام شده است. در شکل (۲) نمودار کلی جریان در محیط شبیه‌سازی هایسیس ارائه شده است. این شبیه‌سازی بر اساس نقشه فرایند تولید متانول شرکت دیوی-مکی تهیه شده و کاملاً منطبق بر واقعیت می‌باشند.

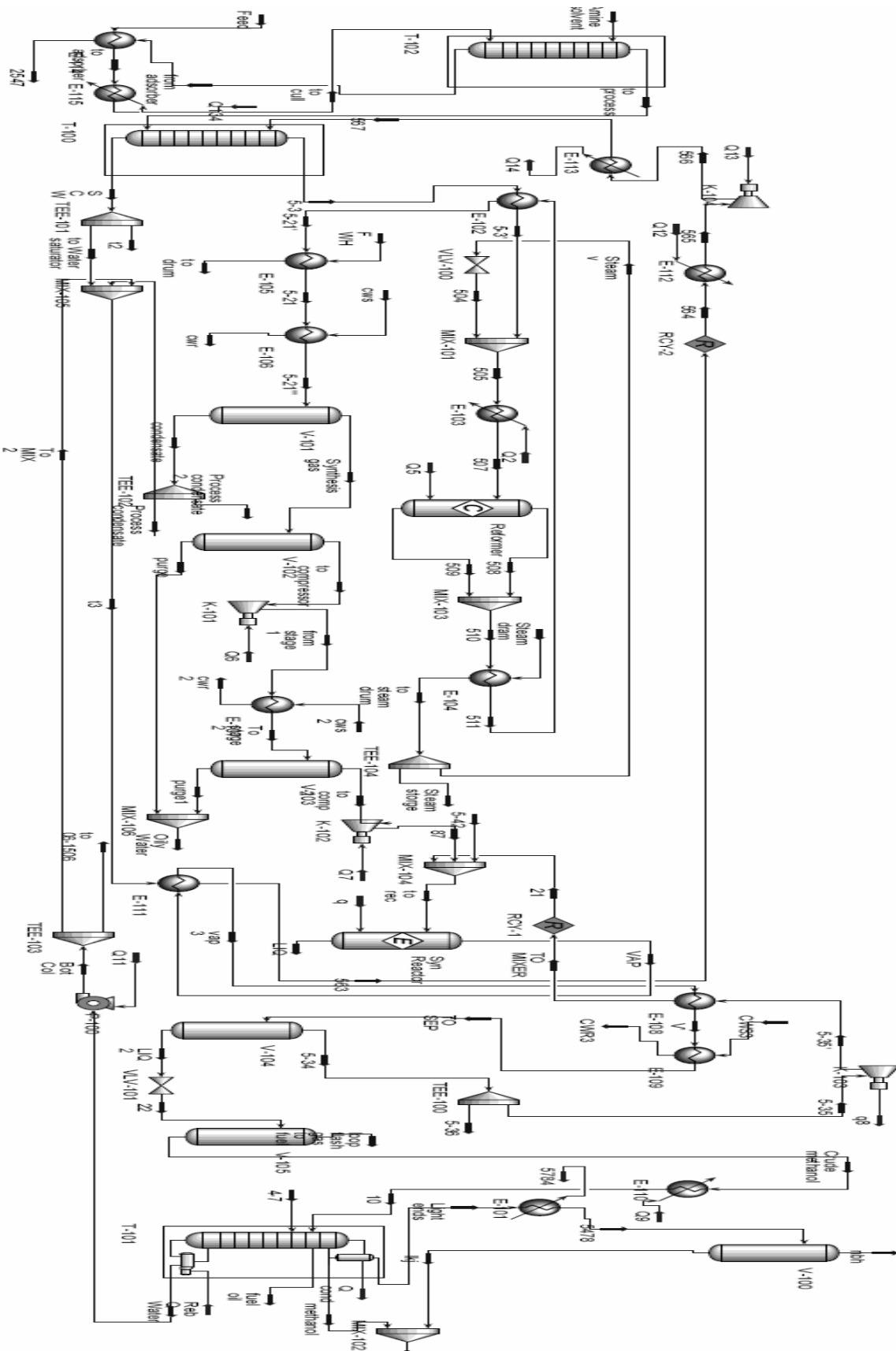
## ۷- نتایج حاصل از شبیه‌سازی

در شبیه‌سازی، کلیه دماها و فشارهای جریان، مطابق نقشه‌های فرایندی می‌باشند، دما و فشار از پارامترهای تنظیم شونده در شبیه‌سازی محسوب می‌شوند. نتایج حاصل از شبیه‌سازی به همراه مقادیر واقعی در نقشه‌های فرایندی، در جدول (۴) ارائه شده‌اند. مقدار خطا، نشان‌دهنده میزان دقت شبیه‌سازی است. قابل ذکر است که جریان‌های اصلی فرایند با یکدیگر مقایسه شده‌اند.

جدول ۳- ترکیب گاز ورودی

اجزاء	مؤکسید کربن	دی اکسید کربن	هیدروژن	نیتروژن	متان	اتان	پروپان	ایزو-پوتان	نرمال-پوتان	ایزو-پنتان	نرمال-پنتان
درصد مولی	۰	۱۲/۳۳	۰	۷/۶۷	۴۴۶/۴۱	۳۵/۳۸	۱۱/۲۶	۱/۰۸	۱/۳۹	۰/۳۸	۰/۲۱

1. Hypothetical



شکل ۲- نمای کلی فرایند شبیه‌سازی شده در هایسیس

جدول ۴- مقایسه داده‌های موجود در نقشه‌های فرایندی و نتایج حاصل از شبه‌سازی

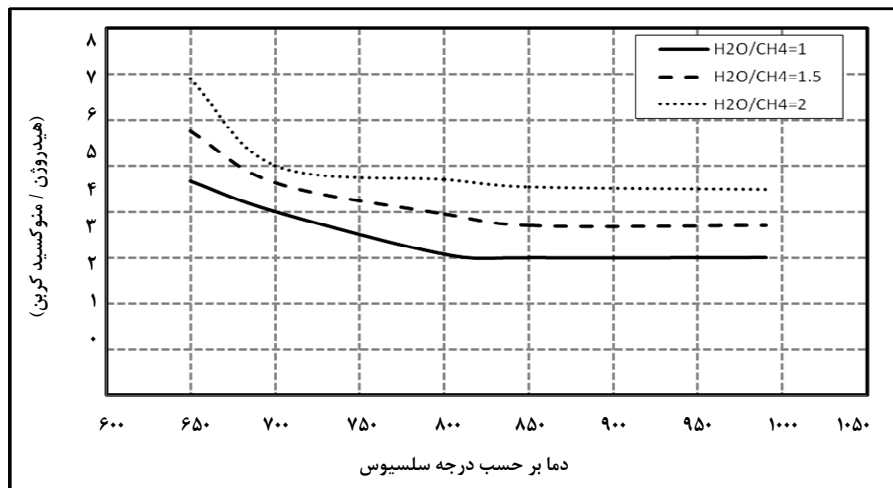
درصد خطا	شبه‌سازی	PED	درصد خطا	شبه‌سازی	PED	درصد خطا	شبه‌سازی	PED	درصد خطا	شبه‌سازی	PED	درصد خطا	شبه‌سازی	PED	درصد خطا	شبه‌سازی	PED	درصد خطا	شبه‌سازی	PED	شدت جریان یونول (مول بر ساعت)	شدت جریان مولی کل	کربن مونوکسید	کربن‌دی اکسید	هیدروژن	متانول	آب			
متانول محصول (۵۲-۵)			قبل از خالص سازی (۲۹-۵)			بعد از راکتور سنتز (۲۳-۵)			قبل از راکتور سنتز (۲۲-۵)			بعد از ریفرمر (۲۱-۵)			قبل از ریفرمر (۲-۵)															
۵/۴	۸۳۶/۹	۸۷۳/۷	۵/۴	۸۳۶/۹	۸۷۳/۷	۷/۵	۱۲۶/۲۸	۱۱۷۴/۱	۱۲	۱۱۳۷۵/۸	۱۲۹۳۵/۹	۳/۹	۳۵۱۲/۱	۳۳۸-۱	۱/۴	۱۴۱۱/۲	۱۳۹۱/۸													
۲۰	۰/۱۲	۰/۱	۲۰	۰/۱۲	۰/۱	۹/۶	۷۹۷/۶	۷۲۷/۵	۱۴/۹	۹۱۴/۷	۱۰۷۵/۳	۱۱/۴	۳۹۵/۱	۳۵۴/۷	۰	۰	۰													
۲۴/۴	۱۵/۵	۱۲/۵	۲۴/۴	۱۵/۵	۱۲/۵	۸/۱	۱۱۸۷/۳	۱۲۹۲/۱	۱۷/۱	۱۲۸۸/۳	۱۵۵۶/۸	۱۴/۲	۲۱۰/۶	۱۸۴/۴	۱/۹	۱۲/۱	۱۲/۳													
۰	۰	۰	۰	۰	۰	۳/۵	۶۸۹۷/۳	۶۶۹۸/۹	۷/۵	۷۵۳۹/۳	۸۱۵۲/۱	۸/۶	۱۷۸۷/۷	۱۶۴۷/۴	۰	۰	۰													
۶	۶۲۲/۵	۵۸۷	۶	۶۲۲/۵	۵۸۷	۰/۶	۶۴۴	۶۴۰	۴/۸	۴۷/۹	۵۰/۳	۰	۰	۰	۰	۰	۰													
۲۷/۹	۱/۸	۱۹۸	۲۷/۹	۱/۸	۱۹۸	۱۰/۲	۱/۹	۲۷۹	۱۷/۲	۱۴/۲	۱۲/۲	۲/۷	۱۱۲/۱	۱/۶	۱۰۹/۱	۱۶	۱۲	۹۸۶	۱۷	۸۴۸										

### ۸-۱ ریفرمر

### ۸- بررسی پارامترهای فرایندی و تعیین شرایط بهینه

در جدول (۵) و شکل (۳) اثر نسبت بخار به متان در تولید گاز سنتز و نسبت هیدروژن به کربن ارائه شده است.

به‌منظور تعیین نقاط بهینه فرایندی و کاهش میزان تولید گازهای گلخانه‌ای، پارامترهای عملیاتی فرایند دیوی (راکتور سنتز متانول و ریفرمر) مورد بررسی قرار گرفته است.



شکل ۳- تغییرات نسبت (آب/متان) در فرایند تبدیل با بخار آب



جدول ۵- تغییرات نسبت (آب/متان) در فرایند تبدیل با بخار آب

دما (°C)	۶۵۰	۷۰۰	۸۰۰	۸۰۰	۹۹۰
نسبت آب به متان	۴/۶۶	۴	۳/۰۷	۳/۰۷	۳
	۵/۷۵	۴/۶۳	۳/۹۶	۳/۹۶	۳/۷
	۶/۹	۵	۴/۷	۴/۷	۴/۴۸

نسبت هیدروژن به متوکسید کربن

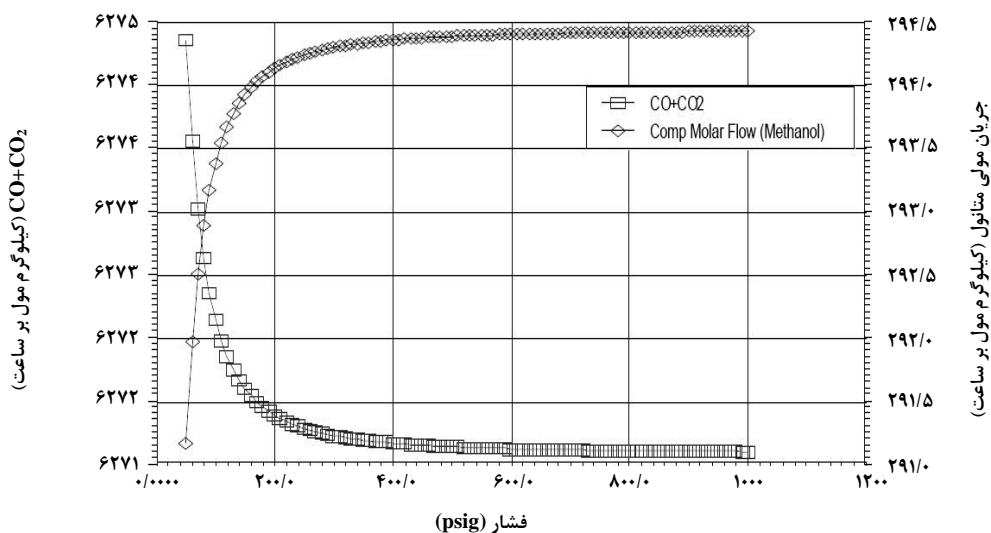
## ۸-۲ راکتور سنتز متانول

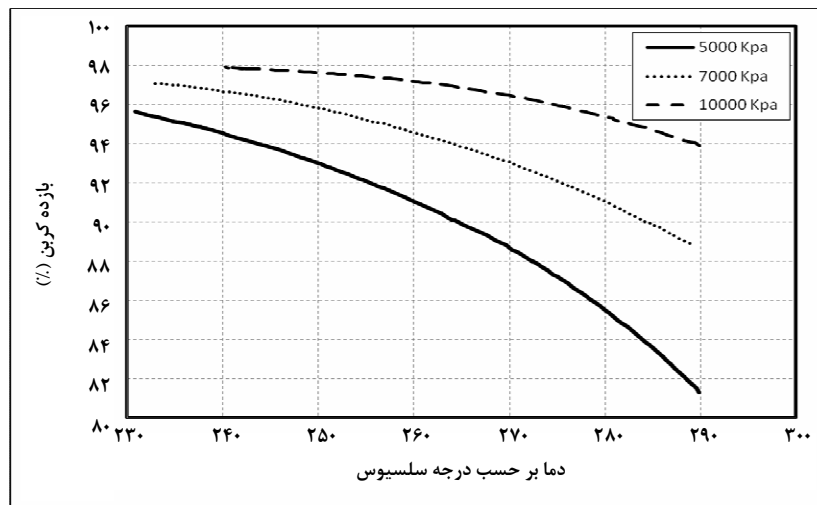
در شکل (۴) اثر فشار بر بازدهی کربن بررسی شده است. همانطور که در شکل پیداست حداقل فشار ترمودینامیکی برای رسیدن به بالاترین سطح تولید متانول، در حد ۶۵۰ psig است در حالی که در عمل این فشار بدلیل پایین بودن توانایی کاتالیزگر در حد ۱۱۴۵ psig می باشد. بنابراین می توان امید داشت که با بهبود خواص کاتالیزگر، واکنش سنتز متانول در دما و فشار پایین تر انجام شود و بدین ترتیب، نرخ مصرف انرژی، کاهش یابد. از طرف دیگر با افزایش فشار، میزان تولید گازهای گلخانه ایی کاهش می یابد که در نتیجه باعث افزایش بازدهی کربن می شود.

در شکل (۵) اثر دما بر بازدهی کربن در فشارهای مختلف بررسی

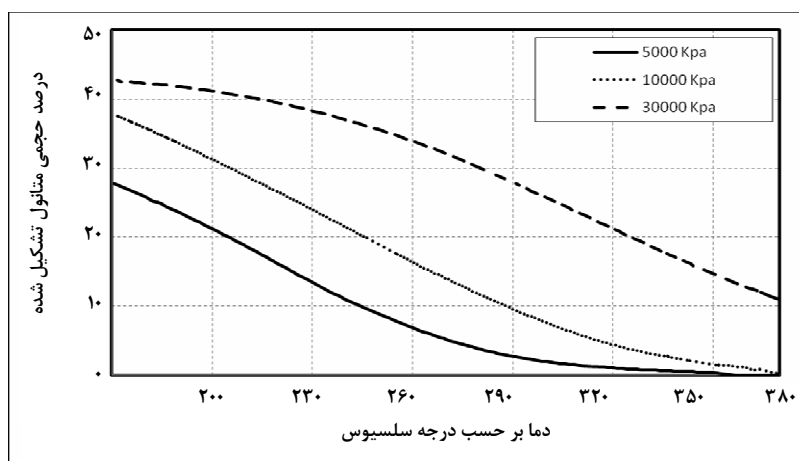
شده است. در این شکل نیز به وضوح مشخص است که در اثر افزایش فشار، بازدهی کربن افزایش می یابد. از طرف دیگر نیز با کاهش دما، بازدهی کربن افزایش خواهد یافت.

در شکل (۶) درصد حجمی متانول تولیدی در فشارهای مختلف ارائه شده است. همانطور که از شکل مشخص است با افزایش فشار و کاهش دما می توان درصد تولید متانول را افزایش داد. نتایج شبیه سازی به دست آمده نشان می دهد که از نظر ترمودینامیکی دمای بهینه تولید، بالاتر از ۱۹۳ درجه سلسیوس است که در عمل نیز این واکنش در دمایی بین ۲۰۰-۲۳۰ درجه سلسیوس انجام می شود.

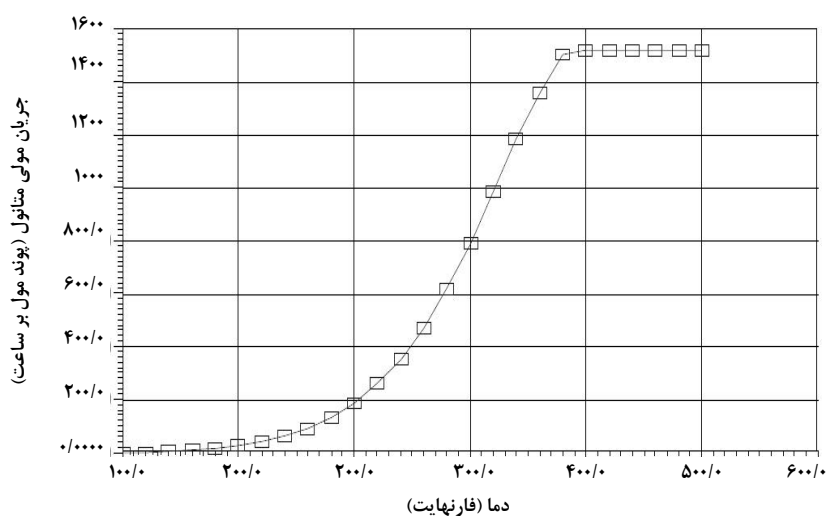
شکل ۴- منحنی فشار و دما بر حسب  $CO_2 + CO$  در راکتور سنتز متانول



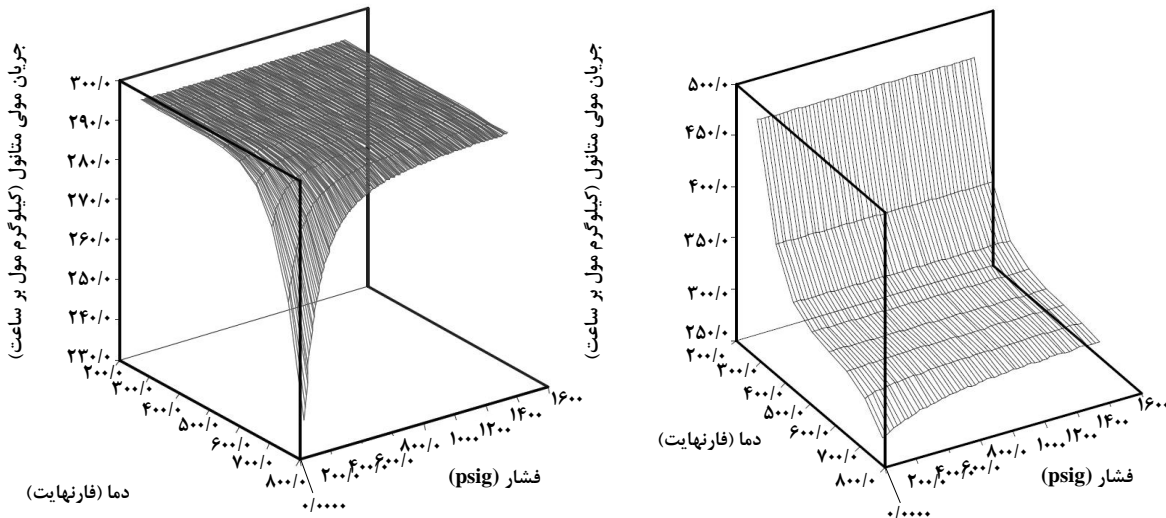
شکل ۵- اثر دما و فشار بر میزان بازدهی کربن در فشارهای مختلف



شکل ۶- منحنی درصد حجمی متانول تولید شده در مقابل دما در فشارهای مختلف



شکل ۷- منحنی دما در مقابل جزء مولی متانول تولید شده در راکتور سنتز متانول



شکل ۸- منحنی سه بعدی فشار و دما در مقابل جزء مولی متانول تولید شده در راکتور سنتز متانول

- پیشنهاد می‌گردد که فرایند مذکور از منظر بهینه‌سازی انرژی، به کمک ابزارهای موجود از جمله تکنولوژی پینچ و اکسرژی، مورد ارزیابی دقیق‌تری قرار گیرد.

#### مراجع

- [1] License Programming, "Hydrocarbon Processing's Petrochemical Processes Handbook", Gulf Publishing, 2nd Edition, pp 97-108, (2005).
- [2] Hang's K. M., Cameron I. T. "process modeling and model analysis", Academic press, Vol 4, pp 63-81, (2001).
- [3] Matar S., "Chemistry of Petrochemical Processes", Gulf Publishing Company, 2nd Edition, pp 10-22, (2004).
- [4] Chauvel A., Lefebvre G., "Petrochemical process technical and economic characteristics synthesis-gas derivatives and major hydrocarbon", institute of France petroleum publication, Vol 1, 2nd Edition, pp 95-102, (1985).
- [5] Prausnitz J.M., Thaler R.L., Azeredo E.G., "Molecular thermodynamics of Fluid Phase Equilibria", Prentice Hall, 2nd Edition, pp 370-416, (1988).
- [6] Yaws C. L., "Handbook of Thermodynamics", Gulf Publishing Company, Vol. 1, pp 85-94, (1996).
- [7] Luyben W. L., "Process Modeling Simulation and Control for Chemical Engineers", McGraw-Hill, New York, 2nd Edition, pp 87-116, (1990).

#### ۹- نتیجه‌گیری

- با توجه به نتایج ارائه شده، موارد زیر قابل استنتاج است:
- شبیه‌سازی فرایند می‌تواند به‌عنوان ابزاری توانمند در تعیین شرایط بهینه فرایندی مورد استفاده قرار گیرد.
  - با توجه به طرح‌های مختلف در زمینه تولید متانول در کشور مانند متانول زاگرس که اخیراً به بهره‌برداری رسیده است و همچنین طرح‌های در دست اجرا و وجود فرایند های مختلف از صاحبان تکنولوژی ارزیابی دقیق و مقایسه‌ای این فرایندها می‌تواند به‌عنوان یک راهنما در انتخاب تکنولوژی، در اختیار مسئولین قرار گیرد.
  - استفاده از ابزارهای شبیه‌سازی در بهینه‌سازی واحد متانول برآورد مناسب‌ترین خوراک، به طور قابل ملاحظه‌ای موجب صرفه‌جویی در انرژی و کاهش گازهای گلخانه‌ای می‌گردد.
  - با بررسی شرایط دما و فشار و همچنین عوامل مؤثر بر عملکرد کاتالیزگر مورد استفاده، می‌توان شرایط بهینه را جهت حداکثر کردن عمر کاتالیزگر با انجام آزمایش‌های آزمایشگاهی و در حد پایلوت، تعیین کرد.
  - چون این فرایند یک فرایند واقعی است، نتایج به‌دست آمده از آن برای واحدهای موجود مستند و قابل استفاده می‌باشد.