مقایسه فرایندهای تبدیل دی‌متیل‌اتر به الفین‌های سبک (DTO) و متانول به الفین-های سبک (MTO) توسط نرم افزار فلوئنت

خدیجه میرزا[1]، محمد قدیری[1]

۱.دانشگاه صنعتی ارومیه، دانشکده مهندسی شیمی

Email: m.ghadiri@uut.ac.ir
mirza.khadijeh@yahoo.com

چکیده:

با توجه به اهمیتی که الفین‌های سبک در صنعت دارند، استفاده از روش‌های نوین برای تولید این مواد با ارزش موجب در اختیار گرفتن بازار رقابت و بهبود اقتصاد کشور می شود. تولید الفین‌های سبک از متانول یکی از جایگزین‌های مناسب برای روش‌های متداول تولید الفین‌ها است. ولی در فرایند تبدیل متانول به الفین‌های سبک (MTO)، الفین‌ها مستقیما از متانول تولید نمی‌شوند، بلکه متانول به دی‌متیل‌اتر تبدیل شده و دی‌متیل‌اتر به الفین‌های سبک تبدیل می‌گردد. با توجه به اینکه هزینه اصلی این فرایند مربوط به تهیه و احیاء کاتالیست است، ایده استفاده‌ی مستقیم از دی‌متیل‌اتر برای تولید الفین‌های سبک بدون حضور کاتالیزور مطرح شده است. در این مقاله با استفاده از نرم‌افزار فلوئنت، مقایسه‌ای برای توزیع محصولات تبدیل مستقیم دی‌متیل‌اتر به الفین‌های سبک(DTO) و MTO انجام گرفته است و نتایج به این صورت بود که گزینش‌پذیری الفین‌های سبک برای DTO بیشتر از MTO است ولی بیشترین درصد جرمی در بین محصولات DTO به متانول اختصاص دارد و این گزینش‌پذیری الفین‌های سبک را کاهش می‌دهد. همچنین روند تغییرات درصد جرمی محصولات با افزایش دما در این دو فرایند عکس هم است.

کلمات کلیدی: دی‌متیل‌اتر، متانول، فلوئنت، الفین، گزینش‌پذیری.

اویل ایندااستری
Oilindustry.ir
CLICK HERE

۱.مقدمه

الفین‌های ســـبک از جمله اتن، پروپن و بوتن به عنوان خوراک‌هایی با ارزش در صـــنعت پتروشـــیمی محسـوب می‌شـوند. به همین دلیل، تقاضـا برای اتیلن و پروپیلن روزبه‌روز در حال افزایش اسـت[۱]. یکی از متداول‌ترین فرایندها برای تولید الفین‌ها کراکینگ حرارتی نفتا اسـت. به دلیل هزینه‌بر بودن و انتشـار مقدار زیادی آلاینده از طریق این فرایند، تولیدکنندگان به دنبال جایگزین‌های مناسب برای آن هستند. الفین‌های ســبک را می‌توان تحت شــرایط خاص از ترکیبات اکســیژن‌دار از جمله الکل‌ها (مثل متانول و اتانول)، اترها (مانند دی‌متیل‌اتر و دی‌اتیل‌اتر) و غیره تولید کرد[۲]. امروزه تبدیل متانول به الفین‌های سبک(MTO) مورد توجه‌ترین فرایند است. برای تبدیل متانول به الفین‌ها ابتدا باید متانول طی یک واکنش تعادلی به دی‌متیل‌اتر تبدیل شود و بعد الفین‌های سبک از مخلوط تعادلی متانول، آب و دی‌متیل‌اتر تولید شوند. ایده‌ای که در این مقاله بررسی می‌شود، استفاده مستقیم از دی‌متیل‌اتر برای تولید الفین‌های سبک بدون کاتالیست، توسط نرم افزارهای گمبیت و فلوئنت است.

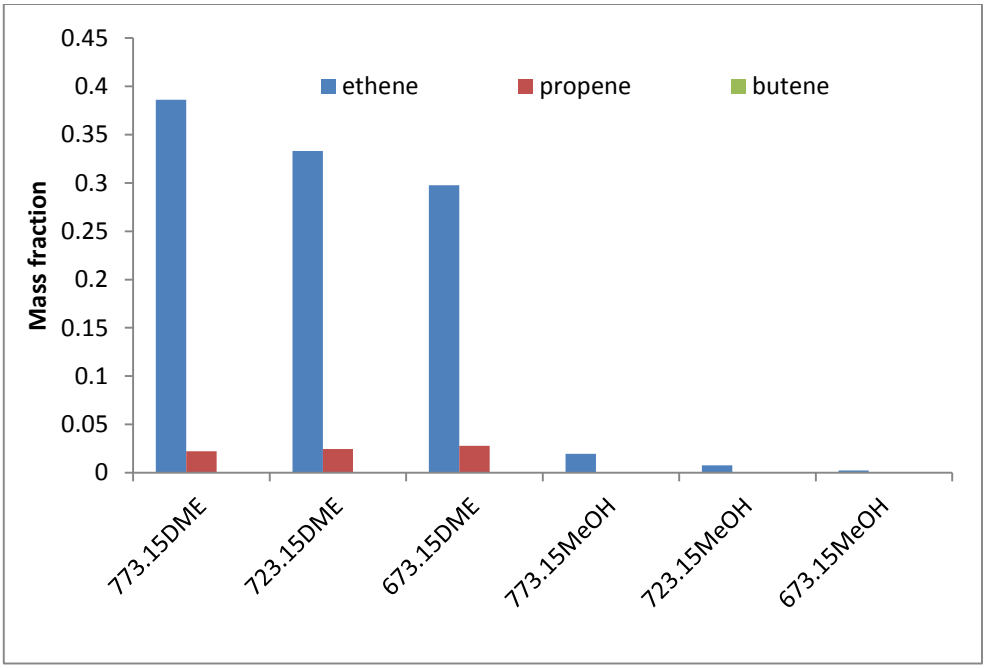
۲.مدلسازی دو فرایند MTO و DTO

هندســه‌ی دو بعدی از ســیال داخل راکتور به طول ۵ متر و عرض ۰/۲ متر در نرم افزار گمبیت طراحی شد و بعد از اعمال شرایط مرزی جرم ورودی، فشار خروجی و دیواره، در نرم افزار فلوئنت فراخوانی شد. برای اعمال واکنش‌های انجام گرفته در راکتور، از مدل سینتیکی پیشنهاد شده توسط طاهری نجفی و همکارانش استفاده شد. این مدل شامل ۱۰ واکنش و ۱۲ ماده است(جدول ۱). برای مقایسه این دو فرایند، برای درصد جرمی متانول و دی‌متیل‌اتر به طور جداگانه مقدار ۱ در ورودی در نظر گرفته شــد و توزیع محصــولات برای دو ماده در سه دمای متفاوت ۶۷۳/۱۵K، ۷۲۳/۱۵ K و ۷۷۳/۱۵ K بدست آمده است.

۳.مقایسه توزیع محصولات

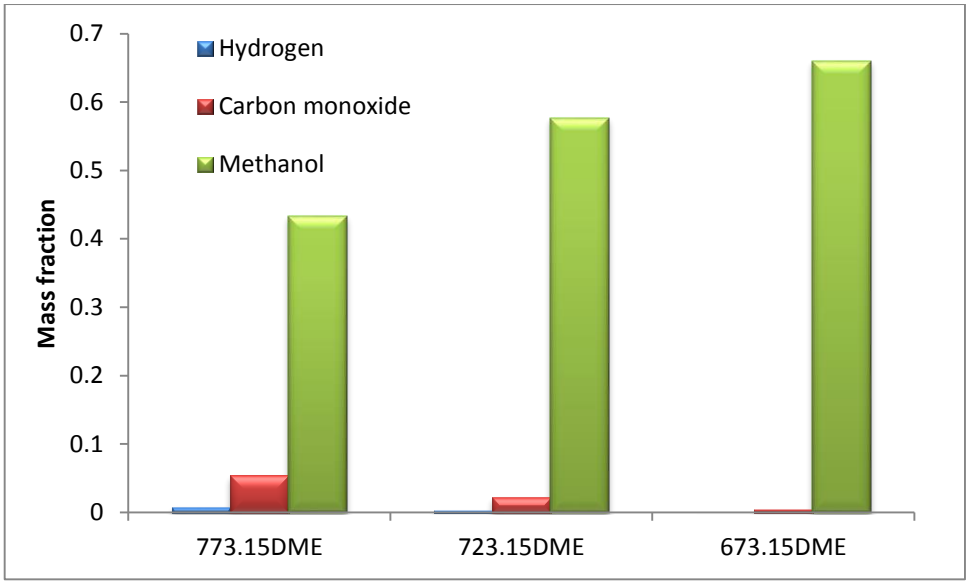
گزینش‌پذیری الفین‌های سبک در سه دمای مختلف برای دو ماده در شکل ۱ نشان داده شده است و همانطور که مشاهده می‌شود بازده فرایند DTO بیشتر از MTO است. در فرایند MTO با افزایش دما بازده

محصولات افزایش می‌یابد ولی در فرایند DTO با افزایش دما بازده محصولات و مخصوصا الفین‌های سبک کاهش می‌یابد. استفاده از MTO بدون کاتالیست در صنعت به صرفه نیست ولی با توجه به نتایج بدست آمده از این مدل سازی، استفاده از فرایند تبدیل دی‌متیل‌اتر به الفین‌های سبک بدون کاتالیست قابل تأمل است.



شکل ۱. مقایسه گزینش‌پذیری الفین‌های سبک برای دو فرایند MTO و DTO.

در واکنش‌های ذکر شده علاوه بر الفین‌های سبک، محصولات دیگری هم تولید می‌شوند که گزینش‌پذیری الفین‌ها را تحت تاثیر قرار می‌دهند. در شکل ۲ درصد جرمی سه محصول غیر از الفین‌ها نشان داده شده است که مقادیر قابل توجهی از آنها در واکنش تبدیل دی‌متیل‌اتر به الفین‌های سبک تولید می شود. همانطور که در شکل ۲ دیده می شود، بیشترین گزینش‌پذیری در فرایند DTO مربوط به متانول است و مقادیری هم مونوکسیدکربن به عنوان آلاینده و هیدروژن تولید می‌شوند. درصد جرمی سایر محصولات علاوه بر آب مقادیر ناچیزی هستند.



شکل۲. درصد جرمی متانول، مونوکسیدکربن و هیدروژن در دماهای مختلف برای واکنش DTO.

۴.نتیجه‌گیری

در این مقاله دو فرایند تبدیل دی‌متیل‌اتر به الفین‌های سبک و متانول به الفین‌های سبک توسط نرم‌افزار فلوئنت در دماهای مختلف مورد بررسی قرار گرفت. با توجه به نتایج بدست آمده می‌توان گفت تغییر در صد جرمی محصولات واکنش با دما برای دو فرایند عکس هم هستند. بازده DTO برای الفین‌های سبک خیلی بیشتر از MTO است و در واکنش DTO مقدار زیادی هم متانول تولید می‌شود که با افزایش دما درصد جرمی آن کاهش می‌یابد. با توجه به اینکه دی‌متیل‌اتر از متانول تهیه می‌شود. استفاده از فرایند DTO مستلزم استفاده از ۲ فرایند جداگانه تولید دی‌متیل‌اتر و تبدیل آن به الفین‌های سبک است. همین امر باعث می‌شود هزینه و تجهیزات به کارگیری فرایند DTO در مقابل فرایند تبدیل متانول به الفین‌های سبک بیشتر شود.

جدول۱. روابط مربوط به مدل سنتیکی ارائه شده توسط گروهی از محققین[۳].

معادله استوکیومتری	معادله سرعت
$2MeOH \overset{k_{r1}}{\Leftrightarrow} \left[(CH_3)_2O\right] + H_2O$	$r_1 = k_{01}\exp(-\frac{E_1}{RT})C_{MeOH}^2 - \frac{k_{01}}{K}\exp(-\frac{E_1}{RT})C_{DME}C_{H_2O}$
$2\left[(CH_3)_2O\right] \overset{k_{r2}}{\rightarrow} 2MeOH + C_2H_4$	$r_2 = k_{02}\exp(-\frac{E_2}{RT})C_{DME}$
$2MeOH \overset{k_{r3}}{\rightarrow} 2H_2O + C_2H_4$	$r_3 = k_{03}\exp(-\frac{E_3}{RT})C_{MeOH}$
$C_2H_4 + DME \overset{k_{r4}}{\rightarrow} C_3H_6 + MeOH$	$r_4 = k_{04}\exp(-\frac{E_4}{RT})C_{DME}C_{C_2H_4}$
$C_3H_6 + DME \overset{k_{r5}}{\rightarrow} C_4H_8 + MeOH$	$r_5 = k_{05}\exp(-\frac{E_5}{RT})C_{DME}C_{C_3H_6}$
$C_4H_8 + DME \overset{k_{r6}}{\rightarrow} C_5H_{10} + MeOH$	$r_6 = k_{06}\exp(-\frac{E_6}{RT})C_{DME}C_{C_4H_8}$
$MeOH \overset{k_{r7}}{\rightarrow} CO + 2H_2$	$r_7 = k_{07}\exp(-\frac{E_7}{RT})C_{MeOH}$
$CO + H_2O \overset{k_{r8}}{\rightarrow} CO_2 + H_2$	$r_8 = k_{08}\exp(-\frac{E_8}{RT})C_{CO}C_{H_2O}$
$MeOH + H_2 \overset{k_{r9}}{\rightarrow} CH_4 + H_2O$	$r_9 = k_{09}\exp(-\frac{E_9}{RT})C_{MeOH}C_{H_2}$
$C_2H_4 + H_2 \overset{k_{r10}}{\rightarrow} C_2H_6$	$r_{10} = k_{010}\exp(-\frac{E_{10}}{RT})C_{C_2H_4}C_{H_2}$

مراجع

[1] A.S. Al-Dughaither, H. de Lasa, Fuel.2014.

[2] T.M.R. john A.Karch, U.S.Pat.(2005).

[3] A. Taheri Najafabadi, S. Fatemi, M. Sohrabi, M. Salmasi, J. Ind. Eng. Chem. 18 (2012).29-37.