

دومین همایش بین المللی نفت، گاز و پتروشیمی، ۲۷ آذر ماه ۱۳۹۳، تهران، ایران
مدل سازی و شبیه سازی راکتور سه فازی هیدروژناسیون در فرآیند تولید ۲- اتیل هگزانول

مجید غلامی^۱، علی دشتی^{۲*}

^۱ دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی شیمی، دانشگاه فردوسی مشهد؛ majidgholami.um@gmail.com

^۲ استادیار مهندسی شیمی، دانشگاه فردوسی مشهد؛ dashti@um.ac.ir

چکیده

در این مقاله، مدل سازی و شبیه سازی پایای راکتور هیدروژناسیون فرآیند تولید ۲- اتیل هگزانول در راکتور سه فازی بستر چکه ای انجام گردید. واکنش های سری در سطح کاتالیست نیکل بر پایه سیلیکا رخ می دهد. از میان مدل های سینتیکی مختلف، مدل سینتیکی مناسب بر اساس مکانیسم جذب لانگمیر- هینشلوود استفاده شد. معادلات انتقال جرم و انتقال حرارت در هر دو فاز گاز و مایع به طور همزمان به کمک نرم افزار متلب حل شد. در این مدل سازی، ضریب تاثیر کاتالیست به صورت مقدار ثابت و متغیر لحاظ شد. نتایج شبیه سازی با داده های در دسترس صنعتی اعتبار سنجی شد و سپس پارامترهای اصلی فرآیند حساسیت سنجی شد. نتایج پیش بینی شده شبیه سازی با داده های واقعی تطابق بسیار خوبی را نشان می دهد. همچنین تاثیر تغییرات دما و غلظت اجزای ورودی بر دمای خروجی و غلظت محصول راکتور مطالعه شد. مدل کنونی می تواند در رابطه با درک رفتار دینامیک راکتور جهت کنترل و بهینه سازی آن مورد استفاده قرار گیرد.

کلمات کلیدی

مدل سازی و شبیه سازی، هیدروژناسیون، ۲- اتیل هگزانول، بستر چکه ای، مدل سینتیکی.

Modeling and Simulation of Three-phase Hydrogenation Reactor in 2-Ethyl Hexanol Production Process

M. Gholami, A. Dashti

ABSTRACT

In this paper, steady-state modeling and simulation of three-phase trickle-bed hydrogenation reactor in 2-ethyl hexanol production process was carried out. The series reactions take place on nickel/silica supported catalyst. Among various kinetic models, the appropriate kinetic model based on Langmuir - Hinshelwood adsorption mechanism was used. The mass and heat transfer equations for both gas and liquid phases were solved simultaneously using MATLAB software. The catalyst effectiveness factor was considered to be constant and variable. The simulation results were validated with available industrial data and then, the sensitivity analysis was done for the main parameters of the process. Predicted results of simulation show very good agreement with the actual data. In addition, effect of inlet temperature and components concentration was studied on output temperature and product concentration. The presented model can be applied to understanding dynamic behavior of reactor particularly for its control and optimization.

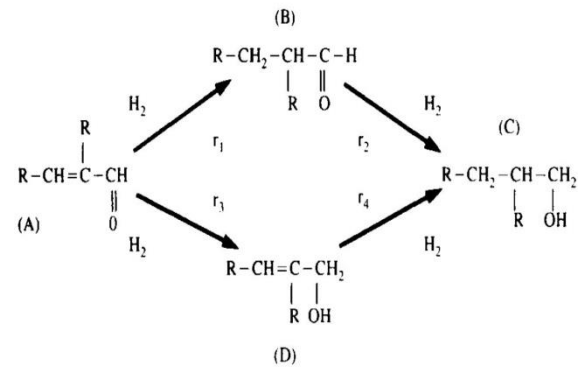
KEYWORDS

Modeling and Simulation, Hydrogenation, 2-Ethyl hexanol, Trickle-bed, Kinetic model.

* گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی، دانشگاه فردوسی مشهد، تلفن: ۰۵۱-۳۸۸۰۵۱۴۹، نمابر: ۰۵۱-۳۸۸۱۶۸۴۰

۱- مقدمه

یکی از فرآیندهای مهم در صنعت پتروشیمی تولید اگزو الکل‌ها است. اگزو الکل‌ها مایعات بی رنگی بوده که شامل ۲- اتیل هگزانول، نرمال بوتانول و ایزوبوتانول هستند. ۲- اتیل هگزانول بعد از الکل‌های سبکی چون متانول و بوتانول به عنوان مهم‌ترین الکل سنتزی شناخته شده است [۱]. در شکل (۱) مسیر انجام واکنش فرآیند هیدروژناسیون ۲- اتیل هگزانال جهت تولید ۲- اتیل هگزانول نشان داده شده است که می‌تواند به دو صورت انجام شود؛ ۱- هیدروژن دار کردن پیوند دوگانه کربن-کربن. ۲- هیدروژن دار کردن گروه کربونیل. اگر واکنش طبق مسیر یک ($r_1 \gg r_3$) انجام شود ماده حد واسط ۲- اتیل هگزانال (B) و اگر واکنش طبق مسیر دو ($r_3 \gg r_1$) انجام شود ماده حد واسط ۲- اتیل هگز-۲- انول (D) است. وجه مشترک هر دو مسیر، تولید محصول یکسان یعنی ۲- اتیل هگزانول (2-EH) (C) می‌باشد [۲].



شکل (۱): مسیرهای واکنش تولید ۲- اتیل هگزانول [۲].

واکنش تولید 2-EH از نظر عملیاتی در فاز گاز یا مایع قابل انجام است. اگر واکنش دهنده‌ها که هیدروژن و ۲- اتیل هگزانال هستند، به صورت فاز گاز وارد راکتور شوند، راکتور دو فاز و اگر هیدروژن در فاز گاز و ۲- اتیل هگزانال در فاز مایع وارد راکتور شوند راکتور سه فاز است. انجام فرآیند در فاز گاز نسبت به فاز مایع احتیاج به تجهیزات با قطر و اندازه بزرگتر داشته و مصرف انرژی در فاز گاز نسبت به فاز مایع بیشتر است. از جمله مزایای سیستم فاز گازی قابلیت احیای کاتالیست می‌باشد [۲ و ۳]. اغلب واحدهای تولید 2-EH در فاز مایع به بهره برداری رسیده و همچنین مطالعات انجام شده در فاز مایع از گذشته تا کنون بیشتر از فاز گاز بوده است.

اسمدلر [۳] جزو نخستین محققانی است که در رابطه با فرآیند هیدروژناسیون ۲- اتیل هگزانال، تحقیقات تجربی واکنش هیدروژناسیون را در حضور سه کاتالیست نیکل، نیکل سولفید و پالادیوم در مقیاس آزمایشگاهی انجام داده است. نتایج تجربی اسمدلر نشان داد که کاتالیست نیکل سولفید و پالادیوم نسبت به

تولید ۲- اتیل هگزانال که ماده حد واسط است انتخاب پذیری بالاتری داشته و 2-EH تولید نمی‌شود، اما کاتالیست نیکل واکنش را تا تولید 2-EH ادامه می‌دهد. بٹ و همکارانش [۲] یکی از جدیدترین مطالعات انجام شده در رابطه با مدلسازی و شبیه سازی دینامیکی هیدروژناسیون ۲- اتیل هگزانال در راکتور سه فاز به بستر چکه‌ای در حضور کاتالیست نیکل بر پایه سیلیکا را انجام دادند. ایشان علاوه بر مقایسه نتایج شبیه سازی با داده های صنعتی، مساله کنترل دمای خروجی راکتور و تاثیر غیر فعال شدن کاتالیست بر خلوص محصول را بررسی کردند.

در مقاله حاضر، مدل سینتیکی مناسب جهت واکنش هیدروژناسیون تولید 2-EH انتخاب شد. علاوه کلیه روابط انتقال جرم بر اساس الگوی جریان راکتور استفاده گردید که در مدلسازی بٹ و همکارانش [۲ و ۳] مورد توجه قرار نگرفته بود. همچنین ضریب تاثیر کاتالیست که در مدل ایشان ثابت فرض شده بود به صورت تابع متغیر بر حسب مدول تیلی (Thiele) لحاظ گردید و آنالیز حساسیت پارامترهای اصلی مدل انجام شد. مقایسه نتایج شبیه سازی حالت پایا با داده‌های واقعی در دسترس نشان داد که تطابق بسیار خوبی وجود دارد و مدل کنونی جهت بررسی رفتار دینامیکی سیستم قابل اطمینان می‌باشد. لازم به ذکر است که تنها واحد صنعتی تولید 2-EH داخل کشور، واقع در شرکت پتروشیمی شازند، به صورت فاز گازی (بخار) می‌باشد. لذا از نظر مدلسازی و شبیه سازی به مراتب آسان‌تر از راکتور سه فاز است و در صورت دستیابی به اطلاعات دقیق این فرآیند می‌توان مدل کنونی را به راحتی بکار گرفت.

۲- مدلسازی و شبیه سازی

در شکل (۲)، دیاگرام جریانی ساده بخش هیدروژناسیون فرآیند تولید 2-EH ارائه شده است [۴]. خوراک راکتور، ۲- اتیل هگزانال در فاز مایع و هیدروژن در فاز گاز بوده که ابتدا وارد یک بافر تانک جهت تراکم می‌شوند، سپس وارد یک مبدل گرمایی شده تا به حداقل دما (۳۷۳ کلوین) و انرژی مورد نیاز جهت شروع واکنش برسند. میزان گرمایی که به خوراک می‌دهند با فعالیت کاتالیست رابطه مستقیم دارد زیرا هرچه کاتالیست قدیمی‌تر شده باشد باید خوراک ورودی را گرم‌تر کنند، افزایش دمای خوراک سبب تولید محصولات ناخواسته، پایین آمدن خلوص محصول و افزایش هزینه انرژی می‌شود. پس از رسیدن دمای خوراک تا حد مورد نظر، خوراک وارد راکتور شده و در سطح کاتالیست نیکل واکنش انجام و 2-EH از انتهای راکتور خارج می‌شود. واکنش هیدروژناسیون ۲- اتیل هگزانال بسیار گرم‌زا است و از طرفی غلظت ۲- اتیل هگزانال در ناحیه واکنش زیاد است که منجر به افزایش دمای راکتور شده و از نظر حرارتی راکتور ناپایدار می‌شود به همین دلیل باید خوراک راکتور رقیق شود که به این منظور، محصول راکتور پس از سرد شدن در کولر تحت عنوان جریان برگشتی با خوراک مخلوط شده که هم باعث افزایش خلوص محصول

با در نظر گرفتن فرضیات فوق معادلات موازنه جرم کلی در فاز گاز و مایع در حالت پایا به شرح زیر است:

$$\frac{\partial Q_L}{\partial Z} = N_{H_G} M_{H_2} a_{L,G} S \quad (1)$$

$$\frac{\partial Q_G}{\partial Z} = -N_{H_G} M_{H_2} a_{L,G} S \quad (2)$$

در روابط فوق S سطح مقطع راکتور، $a_{L,G}$ ویژه انتقال جرم گاز-مایع و N_{H_G} شار انتقال جرم هیدروژن از گاز به مایع است.

$$N_{H_G} = K_{L,G} (C_H^* - C_{H,L}) \quad (3)$$

$$C_H^* = \frac{P_H}{He} \quad (4)$$

که در آن $K_{L,G}$ ضریب انتقال جرم گاز-مایع، C_H^* غلظت هیدروژن در سطح مشترک گاز-مایع و He ضریب هنری است.

موازنه انتقال جرم اجزا در فاز گاز و مایع در حالت پایا به شرح زیر بوده که در این روابط R سرعت واکنش، $\rho_{L,i}$ دانسیته کل فاز مایع و V سرعت هر فاز است [۲].

$$V_{L,z} \left(\frac{\partial C_{enal}}{\partial Z} \right) = -R_1 \rho_{L,i} \quad (5)$$

$$V_{L,z} \left(\frac{\partial C_{anal}}{\partial Z} \right) = -(R_1 - R_2) \rho_{L,i} \quad (6)$$

$$V_{L,z} \left(\frac{\partial C_{anol}}{\partial Z} \right) = -R_2 \rho_{L,i} \quad (7)$$

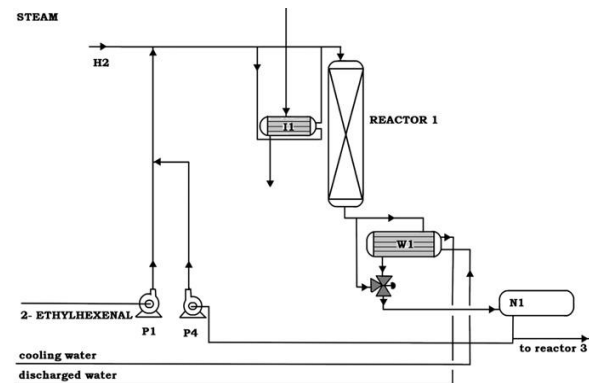
$$\frac{\partial C_{H,G}}{\partial Z} = -\frac{1}{V_{G,z}} (a_{L,G} N_{H_G}) \quad (8)$$

$$\frac{\partial C_{H,L}}{\partial Z} = \frac{1}{V_{L,z}} ((a_{L,G} N_{H_G}) - V_{pH}) \quad (9)$$

مقدار عبارت V_{pH} بیانگر میزان هیدروژن منتقل شده از فاز مایع به سطح کاتالیست است [۲].

$$V_{pH} = \frac{M_{L,H}}{2K_H} \left(\frac{\rho_p k_1 \eta_i}{M_{L,H}} + \frac{K_H P_H}{He} + 1 \right) - \left(\frac{\rho_p k_1 \eta_i}{M_{L,H}} + \frac{K_H P_H}{He} + 1 \right)^{0.5} \left(\frac{4 \left(\frac{K_H}{M_{L,H}} \right) \left(\frac{\rho_p k_1 \eta_i P_H}{He} \right)}{\left(\frac{\rho_p k_1 \eta_i}{M_{L,H}} + \frac{K_H P_H}{He} + 1 \right)} \right) \quad (10)$$

که K ثابت جذب اجزا بر سطح کاتالیست، $M_{L,H}$ مجموع مقاومت انتقال جرم در فاز گاز و مایع و η ضریب تاثیر کاتالیست هستند. ضرایب انتقال جرم درون راکتور پارامترهای مهم و تاثیر گذاری



شکل (۲): دیاگرام جریان بخش هیدروژناسیون فرایند 2-EH [۴].

مشخصات فیزیکی و پارامترهای عملیاتی راکتور مورد نظر در جدول (۱) ذکر شده است. راکتور دارای یک متر قطر و ۱۲ متر ارتفاع می باشد [۴].

جدول (۱): مشخصات فیزیکی و پارامترهای عملیاتی راکتور [۴].

پارامتر	مقدار / کمیت
دبی حجمی هیدروژن	۱۲۵۰ m ³ /hr
دبی حجمی ۲-اتیل هگزنال	۴ m ³ /hr
دبی حجمی محصول برگشتی	۲۴-۳۲ m ³ /hr
دمای خوراک ورودی	۳۶۳-۳۹۳ K
فشار هیدروژن ورودی	۲/۵ Mpa
کسر حجمی فضای خالی	۰/۱۵
سرعت گاز	۰/۴۵۲۰ m/s
سرعت مایع	۰/۱۰۰۸ m/s
دانسیته کاتالیست	۶۸۰ Kg/m ³
قطر ذرات کاتالیست	۰/۰۰۴ m
سطح ویژه انتقال جرم مایع-جامد	۱۲۷۵ m ⁻¹

۱-۲- بررسی انتقال جرم

در فرایند هیدروژناسیون، هیدروژن در فاز گاز و ۲- اتیل هگزنال در فاز مایع قرار دارد. مسیر انتقال جرمی اجزای واکنشگر عبارتست از: انتقال هیدروژن از فاز گاز به سطح مشترک گاز مایع و از آنجا به دورن فاز مایع، انتقال واکنش دهنده ۲- اتیل هگزنال و هیدروژن به سطح مشترک مایع-جامد و سپس جذب سطحی واکنشگرها در سطح کاتالیست. پس از انجام واکنش شیمیایی واکنشگرها در سطح کاتالیست، محصول از سایت‌های فعال کاتالیست دفع شده و وارد فاز مایع می شود.

برای سهولت در بیان انتقال جرم درون راکتور، و قبل از بررسی موازنه جرم جزئی و کلی، فرضیات حاکم بر سیستم باید بیان شود. از جمله فرضیات در نظر گرفته شده برای انجام موازنه جرم در فاز گاز و مایع می توان به حالت پایا، تک بعدی در راستای محور راکتور، سرعت هر دو فاز ثابت و انجام واکنش تنها بر سطح کاتالیست اشاره

۲-۲- بررسی انتقال حرارت

از آنجا که واکنش تولید 2-EH در فاز مایع انجام شده و گرمای زیادی تولید می‌کند، پروفایل دما در فاز مایع نسبت به فاز گاز تغییرات بیشتری را دارا است. جهت انجام موازنه انرژی ابتدا باید فرضیات در نظر گرفته شود و سپس برای هر فاز جداگانه اقدام به موازنه انرژی گردد [۷ و ۸]. فرض می‌شود انتقال حرارت در حالت پایا، یک بعدی و در راستای محوری (جهت Z) باشد و اثر هدایت و تشعشع ناچیز است. با توجه به این فرضیات، معادله نهایی انتقال حرارت در فاز گاز و مایع حاصل شده‌اند [۲ و ۱۰].

$$V_{Gz} \left(\frac{\partial T_G}{\partial z} \right) = \sum \frac{\Delta H_i R_i}{C_{p,G}} \quad (19)$$

$$V_{Lz} \left(\frac{\partial T_L}{\partial z} \right) = \sum \frac{\Delta H_i R_i}{C_{p,L}} \quad (20)$$

که ΔH آنتالپی واکنش، R سرعت واکنش و C_p ظرفیت حرارتی هر فاز است.

۳-۲- مدل سینتیکی منتخب

در ارتباط با جذب بر سطح کاتالیست مکانیسم‌های مختلفی با فرضیات گوناگون وجود دارد، که مکانیسم جذب لانگمیر-هینشلوود (LH) مکانیسم غالب در واکنش‌های کاتالیستی ناهمگن می‌باشد. معادلات سرعت واکنش تبدیل ۲- اتیل هگزنال به ۲- اتیل هگزنال (R_1) و سرعت واکنش تبدیل ۲- اتیل هگزنال به 2-EH (R_2) عبارتند از [۲]:

$$R_1 = \frac{K_1 K_a K_H C_a C_{H_2}}{(1 + K_a C_a + K_\beta C_\beta + \sqrt{K_H C_{H_2}})^3} \quad (21)$$

$$R_2 = \frac{K_2 K_\beta K_H C_\beta C_{H_2}}{(1 + K_a C_a + K_\beta C_\beta + \sqrt{K_H C_{H_2}})^3} \quad (22)$$

که در آن C_a غلظت ۲- اتیل هگزنال و C_β غلظت ۲- اتیل هگزنال هستند.

۴-۲- ضریب تاثیر کاتالیست

ضریب تاثیر کاتالیست کمیتی بدون بعد است که با نماد η نمایش داده می‌شود. این کمیت بیانگر نسبت سرعت واکنش به بیشترین سرعت واکنش می‌باشد. منظور از بیشترین سرعت واکنش، سرعت واکنش بدون در نظر گرفتن مقاومت نفوذ در حفرات کاتالیست می‌باشد [۹، ۱۱].

هستند که باید با توجه به نوع رژیم جریان درون راکتور، تعیین شوند؛ (در اینجا رژیم جریان درون راکتور از نوع پالس است) ضرایب انتقال جرم بر حسب m/s و سطوح مشترک انتقال جرم بر حسب s^{-1} مطابق ذیل می‌باشند [۵ و ۸].

ضریب و سطح مشترک انتقال جرم گاز - مایع [۹]:

$$\frac{k_{L,G} a_{L,G} d_p^2 0.11}{\left(1 - \frac{\varepsilon_L}{\varepsilon}\right) D_m} = Re_L Re_G^{0.4} \left(\frac{\mu_L}{D_m}\right)^{0.5} \left(\frac{d_p}{d_t}\right)^{-0.3} \quad (11)$$

$$\frac{a_{L,G} d_t}{\left(1 - \frac{\varepsilon_L}{\varepsilon}\right)} = 0.0059 Re_L^{0.66} Re_G^{0.2} \left(\frac{S_p}{d_p^2}\right)^{-0.3} \quad (12)$$

ضریب و سطح مشترک انتقال جرم مایع - جامد [۹]:

$$k_{S,L} = 1.637 V_L Re_L^{-0.33} \left(\frac{\mu_{L,t}}{\rho_L D_m}\right)^{-0.66} \quad (13)$$

$$a_{S,L} = \frac{6(1-\varepsilon)}{d_p} \quad (14)$$

ضریب انتقال جرم در فاز گاز [۹]:

$$k_G a_{L,G} = 2 + 0.1 E_G^{0.66} \quad (15)$$

ضریب انتقال جرم کلی در فاز مایع:

$$\frac{1}{K_{L,G}} = \frac{1}{k_G He'} + \frac{1}{k_{L,G}} \quad (16)$$

همچنین مجموع مقاومت انتقال جرم در فاز گاز و مایع:

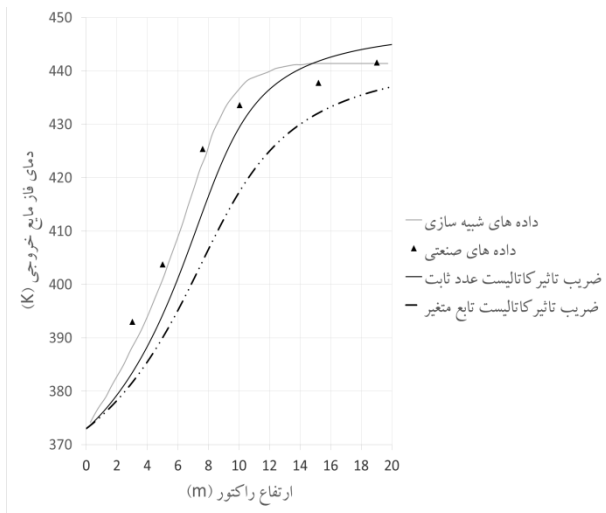
$$\frac{1}{M_{L,H}} = \frac{1}{K_{L,G} a_{L,G}} + \frac{1}{K_{S,L} a_{S,L}} \quad (17)$$

افت فشار پارامتر مهمی در بحث طراحی راکتورهای چکه‌ای است و در محاسبه ضرایب انتقال جرم میان گاز - مایع و مایع - جامد، ضریب خیس شونده کاتالیست و ضرایب انتقال حرارت کاربرد دارد. از رابطه معروف ارگان برای محاسبه افت فشار در بستر استفاده می‌شود:

$$\delta = 150 \left(\frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^2} \right) \left(\frac{V \mu}{d_p^2} \right) + 1.75 \left(\frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3} \right) \left(\frac{V^2 \rho}{d_p} \right) \quad (18)$$

که در آن V سرعت هر فاز، ε کسر حجمی فضای خالی در بستر، d_p قطر کاتالیست و μ ویسکوزیته هر فاز می‌باشد.

دومین همایش بین المللی نفت، گاز و پتروشیمی، ۲۷ آذر ماه ۱۳۹۳، تهران، ایران
تأثیر متغیر به دمای ۴۳۸ درجه کلوین می‌رسد.



شکل (۴): تغییر دمای فاز مایع در طول راکتور هیدروژناسیون. با توجه به مقایسه میان نتایج حاصل از مدل ارائه شده در دو حالت ضریب تاثیر ثابت و متغیر و داده‌های صنعتی و شبیه سازی [۲]، مدل سینتیکی ارائه شده به خوبی نرخ تغییرات دما و غلظت اجزا درون راکتور را، بیان می‌کند. این مدل بر پایه مکانیسم جذب LH بوده و در آن فرضیات جذب تجزیه‌ای هیدروژن و رقابت میان تمامی واکنش دهنده‌ها برای رسیدن به سایت‌های فعال کاتالیست، در نظر گرفته شده‌است.

تعیین رابطه افت فشار در فاز گاز و مایع درون راکتورهای بستر چکه‌ای اهمیت بسیاری دارد، زیرا همبستگی و ارتباط میان ضرایب انتقال جرم که تابع افت فشار می‌باشند، ایجاد می‌کند. رابطه ارگان تابعیتی از کسر حجمی فضای خالی در بستر، سرعت فاز، ویسکوزیته و دانسیته فاز مورد نظر دارا می‌باشد. مطابق شکل (۵)، در فاز گاز فشار از ۲۵۰۰ کیلو پاسکال به ۱۷۰۰ کیلو پاسکال کاهش می‌یابد و افت فشاری معادل ۸۰۰ کیلو پاسکال دارد و در فاز مایع فشار فاز مایع از ۲۵۰۰ کیلو پاسکال به ۲۲۰۰ کاهش می‌یابد و افت فشاری معادل ۳۰۰ کیلو پاسکال است.

۳-۱- آنالیز حساسیت پارامترهای اصلی

پس از اطمینان از منطبق بودن نتایج مدل با داده‌های صنعتی و شبیه سازی، در بخش بعد نحوه پاسخ گویی مدل به تغییر پارامتر-های عملیاتی راکتور، مورد بررسی قرار می‌گیرد تا از دقت مدل ارائه شده در شرایط مختلف راکتور اطمینان حاصل شود. خوراک ورودی به راکتور جهت انجام واکنش هیدروژناسیون، قبل از ورود به راکتور می‌بایست تا دمای مشخصی گرم شده تا به انرژی مورد نیاز برای شروع واکنش دست یابد. از طرفی میزان گرمایی که به خوراک داده می‌شود با فعالیت کاتالیست رابطه مستقیم دارد زیرا هرچه کاتالیست قدیمی‌تر باشد باید خوراک ورودی را گرم‌تر کنند؛ افزایش دمای خوراک سبب تولید محصولات ناخواسته، پایین آمدن خلوص محصول و افزایش هزینه انرژی می‌شود.

$$\eta_i = \frac{1}{\phi} \left(\coth 3\phi - \frac{1}{3\phi} \right) \quad (23)$$

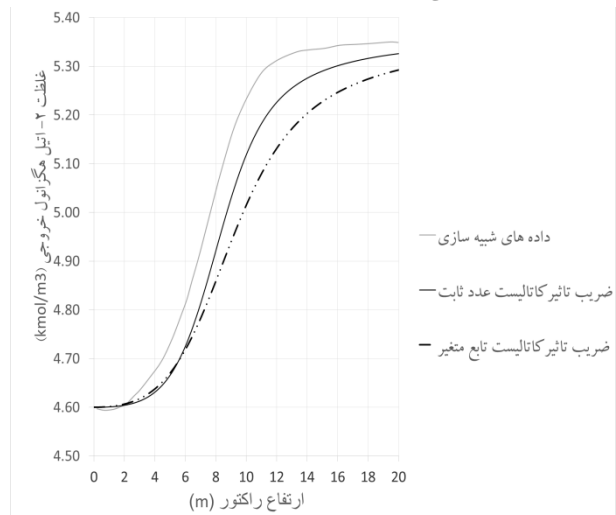
$$\phi_i = \frac{d_p}{6} \sqrt{\frac{K_i}{D_e}} \quad (24)$$

که در آن ϕ ضریب مدول تیلی و D_e ضریب نفوذ موثر درون منافذ کاتالیست بر حسب m^2/s می‌باشد [۹].

۳- نتایج و بحث

با مشخص شدن مدل انتقال جرم و حرارت و همچنین مدل سینتیکی، در محیط نرم افزار متلب به شبیه سازی راکتور پرداخته و نتایج شبیه سازی با داده‌های صنعتی مقایسه شد. در بحث ارائه نتایج شبیه سازی می‌توان دو حالت در نظر گرفت، نخست حالتی است که مطابق فرض بٹ و همکارانش [۲] ضریب تاثیر کاتالیست ثابت و برابر ۰/۱۲ در نظر گرفته می‌شود. حالت دوم ضریب تاثیر کاتالیست متغیر و از رابطه (۲۴) محاسبه شده و اثر آن در سرعت واکنش لحاظ می‌شود. در نهایت آنالیز حساسیت بر روی پارامترهای اصلی مدل راکتور مطالعه گردید.

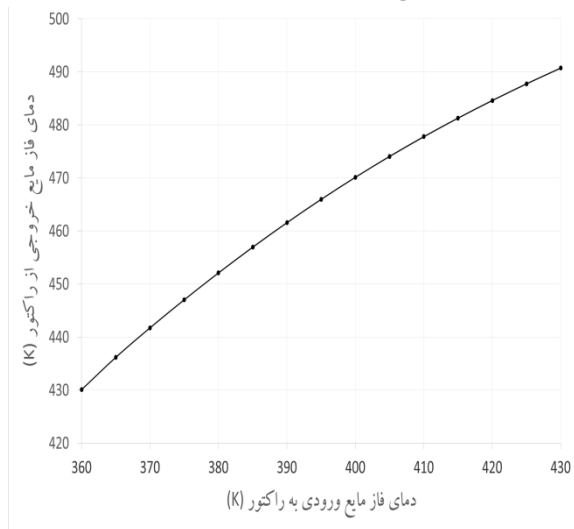
شکل (۳) نشان دهنده تغییرات غلظت 2-EH در طول راکتور است. تغییرات غلظت محصول در شبیه سازی راکتور با در نظر گرفتن ضریب تاثیر کاتالیست به عنوان عدد ثابت، انطباق مناسبی با داده‌های شبیه سازی موجود [۲] دارد. روند تغییرات غلظت محصول با در نظر گرفتن ضریب تاثیر کاتالیست به صورت تابع متغیر، از نظر مقداری از دو نمودار دیگر کمتر است؛ زیرا ضریب تاثیر کاتالیست در طول راکتور تغییر می‌کند.



شکل (۳): تغییر غلظت محصول 2-EH در طول راکتور.

نرخ تغییرات دما در طول راکتور در شکل (۴) قابل مشاهده‌است؛ تغییرات دمای فاز مایع درون راکتور از دمای ورودی ۳۷۳ درجه کلوین شروع شده و به دمای ۴۴۰ درجه کلوین در خروجی می‌رسد. نتیجه شبیه سازی با مدل سینتیکی مورد نظر با ضریب تاثیر کاتالیست ثابت، در نهایت به دمای ۴۴۵ درجه کلوین و با ضریب

تغییرات دمای خروجی دارد در شکل (۷) قابل مشاهده است.



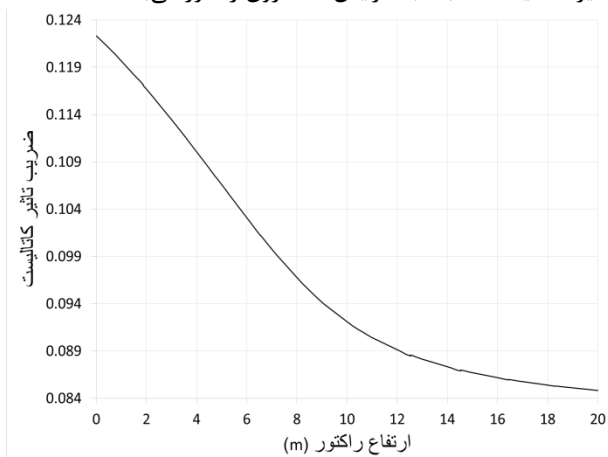
شکل (۷): بررسی دمای خروجی راکتور با تغییر دمای ورودی.

تاثیری که افزایش ۱۰ درجه‌ای دمای ورودی در محدوده‌های مختلف بر روی دمای خروجی دارد در جدول (۲) مشاهده می‌شود.

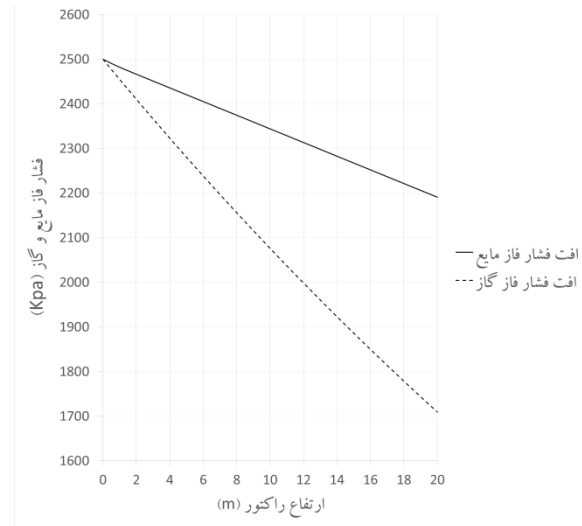
جدول (۲): حساسیت دمای خروجی نسبت به دمای ورودی

تغییر دمای خروجی	تغییر دما ورودی	محدوده دمای ورودی
۱۲K	۱۰K	۳۶۰-۳۸۰K
۹K	۱۰K	۳۸۰-۴۰۰K
۷K	۱۰K	۴۰۰-۴۳۰K

ضریب تاثیر کاتالیست تابع مدول تیلی ϕ بوده که مدول تیلی نیز تابع دما، تخلخل کاتالیست و میزان پیچ و خم منافذ کاتالیست می‌باشد. با توجه به اینکه ویژگی‌های کاتالیست ثابت مانده و دما تغییر می‌کند، منطقی است که ضریب تاثیر کاتالیست در طول راکتور با افزایش دما تغییر کند. شکل (۸) نشان‌دهنده تغییرات ضریب تاثیر کاتالیست در طول راکتور و شکل (۹) نشان‌دهنده تغییرات ضریب تاثیر کاتالیست نسبت به افزایش دما درون راکتور می‌باشد.

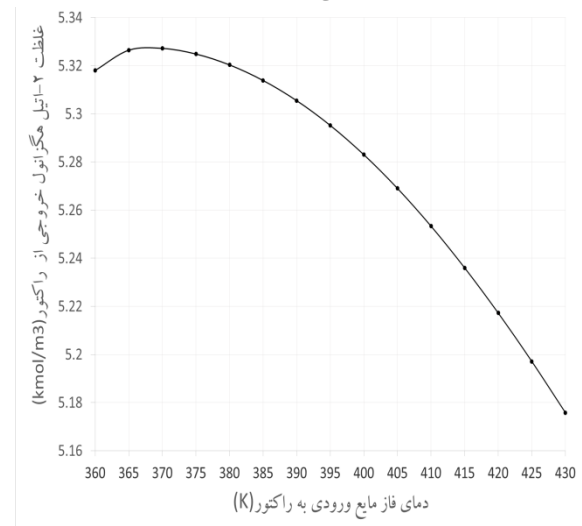


شکل (۸): تغییرات ضریب تاثیر کاتالیست در طول راکتور.



شکل (۵): نمودار تغییرات فشار فاز گاز و مایع درون راکتور.

مطابق شکل (۶)، حساسیت خلوص محصول نهایی با تغییرات دما بررسی شده است. دمای ورودی به راکتور از ۳۶۰ تا ۴۳۰ درجه کلون افزایش یافته و غلظت محصول تغییر می‌کند. نتایج حاصله، مطابق با پیش بینی‌های مورد انتظار است، چرا که بالاترین غلظت محصول بین ۵/۳۲ تا ۵/۳۴ کیلومول بر متر مکعب در دمای بین ۳۶۵ تا ۳۸۰ کلون بدست می‌آید در حالی که با افزایش دمای خوراک از ۳۸۰ تا ۴۳۰ درجه کلون غلظت محصول به سرعت کاهش یافته و تا ۵/۱۶ کیلومول بر متر مکعب می‌رسد.



شکل (۶): بررسی میزان غلظت محصول با تغییرات دمای ورودی راکتور.

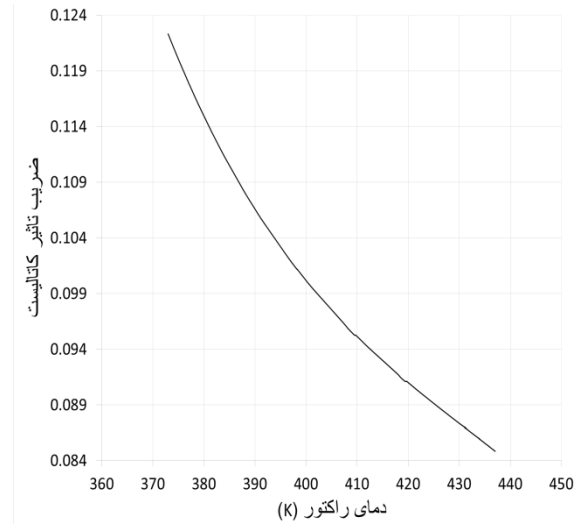
در راکتور هیدروژناسیون ۲- اتیل هگزنال خوراک ورودی در دمای ۳۷۳ درجه کلون وارد راکتور می‌شود؛ واکنش به شدت گرمازا بوده و طبیعتاً دمای مایع خروجی از ورودی بیشتر است. جهت بررسی میزان حساسیتی که مدل به تغییرات دما دارد، دمای ورودی را از ۳۶۰ تا ۴۳۰ درجه کلون تغییر داده و تاثیری که بر روند

K_i	$\frac{\text{mol}}{\text{s.Kgcat}}$	ثابت سرعت واکنش
K_j	$\frac{\text{m}^3}{\text{mol}}$	ثابت تعادل جذب اجزا،
M_{H_2}	$\frac{\text{gr}}{\text{mol}}$	جرم ملکولی هیدروژن،
S_p	m^2	سطح جانبی ذرات کاتالیست،
علائم یونانی		
ε		نسبت حجم فضای خالی به حجم بستر
ε_L		ماندگی مایع در بستر
$\rho_{L,i}$	$\frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}$	دانسیته کل فاز مایع،
$\mu_{L,i}$	Pa.s	ویسکوزیته کل فاز مایع،

۵- مراجع

- [1] L. Yuan and X. Hui-feng, "Oxo Market Supply and Demand Forecast and Investment Economic Analysis," *Finance Research*, vol. 1, pp. 4-10, 2012.
- [2] R. Both, A. M. Cormos, P.-S. Agachi, and C. Festila, "Dynamic modeling and validation of 2-ethyl-hexenal hydrogenation process," *Computers & Chemical Engineering*, vol. 52, pp. 100-111, 2013.
- [3] R. Both, E. H. Dulf, and C. Festila, "Robust control of a catalytic 2 ethyl-hexenal hydrogenation reactor," *Chemical Engineering Science*, vol. 74, pp. 300-309, 2012.
- [4] G. Smedler, "Kinetic analysis of the liquid phase hydrogenation of 2-ethyl-hexenal in the presence of supported Ni, Pd and Ni-S catalysts," *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 67, pp. 51-61, 1989.
- [5] R. Both, "2 Ethyl-hexanol Output Temperature Control in Hydrogenation process," presented at the 6th IEEE International Symposium on Applied Computational Intelligence and Informatics, Romania, 2011.
- [6] J. Gáspár and A. M. Cormos, "Dynamic modeling and validation of absorber and desorber columns for post-combustion CO₂ capture," *Computers & Chemical Engineering*, vol. 35, pp. 2044-2052, 2011.
- [7] A. Lawal, M. Wang, P. Stephenson, G. Koumpouras, and H. Yeung, "Dynamic modelling and analysis of post-combustion CO₂ chemical absorption process for coal-fired power plants," *Fuel*, vol. 89, pp. 2791-2801, 2010.
- [8] K. Prölb, H. Tummescheit, S. Velut, and J. Åkesson, "Dynamic model of a post-combustion absorption unit for use in a non-linear model predictive control scheme," *Energy Procedia*, vol. 4, pp. 2620-2627, 2011.
- [9] Ramachandran, P.; Chaudhari, R., *Three-phase catalytic reactors*. Gordon and Breach New York: 1983.
- [10] M. Iancu, M. V. Cristea, and P. S. Agachi, "Retrofit design of heat exchanger network of a fluid catalytic cracking plant and control based on MPC," *Computers & Chemical Engineering*, vol. 49, pp. 205-216, 2013.
- [11] E. H. Dulf, C. I. Pop, and F.-V. Dulf, "Fractional calculus in 13C separation column control," *Signal, Image and Video Processing*, vol. 6, pp. 479-485, 2012.
- [12] E. H. Dulf, C. I. Pop, and F. Dulf, "Systematic Modeling of the (13C) Isotope Cryogenic Distillation Process," *Separation Science and Technology*, vol. 47, pp. 1234-1240, 2012.

به دلیل اینکه واکنش گرمازا بوده و در طول راکتور دما زیاد می شود، ضریب تاثیر کاتالیست کاهش می یابد، زیرا با افزایش دما ضریب نفوذ موثر در منافذ کاتالیست افزایش یافته در نتیجه مدول تیلی و بالتبع ضریب تاثیر کاتالیست در طول راکتور کم می شود.



شکل (۹): تغییرات ضریب تاثیر کاتالیست نسبت به دمای راکتور.

۴- نتیجه گیری

با توجه به نتایج ارائه شده و آنالیز حساسیت پیرامون مدل ارائه شده، می توان نتیجه گرفت که مدل پیشنهادی به خوبی قادر است رفتار راکتور در شرایط عملیاتی واقعی را پیش بینی کند. کلیه روابط ذکر شده پیرامون پدیده های انتقال و همچنین مدل سینتیکی ارائه شده، به خوبی توانسته اند در فرآیند شبیه سازی راکتور در نرم افزار متلب، نتایج منطبق با داده های صنعتی ایجاد کنند. از مدل ارائه شده می توان در مباحث مربوط به شبیه سازی پایا، غیر فعال شدن کاتالیست و ارائه مدل های کنترلی استفاده نمود.

فهرست علائم

C_α	$\frac{\text{Kmol}}{\text{m}^3}$	غلظت ۲- اتیل هگزنال،
C_β	$\frac{\text{Kmol}}{\text{m}^3}$	غلظت ۲- اتیل هگزنال،
d_p		قطر ذرات کاتالیست، m
d_t		قطر راکتور، m
$D_{L,G}$	$\frac{\text{m}^2}{\text{s}}$	ضریب نفوذ ملکولی گاز در اجزای فاز مایع،
D_m	$\frac{\text{m}^2}{\text{s}}$	ضریب نفوذ ملکولی گاز در مخلوط فاز مایع،
He	$\frac{\text{Pa.m}^3}{\text{Kmol}}$	ثابت هنری،
He'		ثابت هنری، بدون بعد