



## بررسی تولید الفین‌های سبک از متان به جای متانول توسط نرم افزار فلوئنت

خدیجه میرزا<sup>۱</sup>، محمد قدیری<sup>۲</sup>

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی ارومیه، دانشکده مهندسی شیمی

۲- استادیار گروه مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی ارومیه، دانشکده مهندسی شیمی

Email: [m.ghadiri@uut.ac.ir](mailto:m.ghadiri@uut.ac.ir)

[mirza.khadijeh@yahoo.com](mailto:mirza.khadijeh@yahoo.com)

### چکیده:

با توجه با اهمیت اتیلن و پروپیلن به عنوان خوراک واحدهای الفین پترو شیمی، مطالعه فرایندهای تولید این مواد بسیار مورد توجه قرار گرفته است و انتخاب بهینه‌ترین فرایند برای محققان و تولیدکنندگان از اهمیت خاصی برخوردار است. مورد توجه‌ترین فرایند برای تولید الفین‌های سبک، تبدیل متانول به اتیلن (MTO) و پروپیلن است. در این مقاله، فرایند تبدیل متان به هیدروکربن‌های با ارزش توسط نرم‌افزار فلوئنت بررسی شده است و اثر دما، نسبت  $CH_4/O_2$  و ترکیب آب در خوراک بر بازده اتیلن بدست آمد. نتایج حاصل به این صورت بود که با افزایش دما و کاهش نسبت  $CH_4/O_2$  بازده کاهش می‌یابد و ترکیب آب در خوراک تاثیر منفی بر بازده واکنش دارد. در نهایت از مقایسه تبدیل متانول به اتیلن و تبدیل متان به اتیلن نتیجه حاصل گردید که فرایند MTO از نظر اقتصادی فرایند مناسب‌تری برای تولید اتیلن است.

**کلمات کلیدی:** متانول، متان، الفین، فلوئنت، بازده.

## ۱. مقدمه

امروزه به دلیل مصرف بالای محصولات صنایع پترو شیمی، تقاضا برای خوراک پترو شیمی ها از جمله اتیلن و پروپیلن، در حال افزایش است [۱]. فرایندهای متنوعی برای تولید الفین های سبک وجود دارد [۲, ۳] که فرایند نوپای تبدیل متانول به الفین های سبک (MTO) نسبت به بقیه فرایندها، توجه محققان و تولیدکنندگان را بیشتر به خود معطوف کرده است. یکی از راه های تولید متانول، فرایند فیشر- تروپش (استفاده از گاز سنتز) است. از طرفی الفین های سبک از جمله اتیلن را می توان از متان تولید کرد [۴]. در این صورت می توان به جای متانول، از متان برای تولید الفین های سبک استفاده کرد که این حالت تعداد مراحل کمتر و ظاهراً هزینه ی کمتری دربر دارد ولی یکی از مهم ترین مسائل در مورد استفاده از متان، هزینه زیاد انتقال گاز به واحدهای الفین است. علاوه بر این، این فرایند در دما و فشارهای بالایی انجام می شود که مستلزم صرف هزینه های بالا است [۵]. در این مطالعه تولید هیدروکربن ها از متان و در غیاب کاتالیزور توسط نرم افزار های گمبیت و فلونت بررسی شده است. اثر پارامترهایی مثل دما، نسبت واکنش دهنده ها ( $CH_4/O_2$ ) و ترکیب آب در خوراک بررسی شده است و در نهایت نتایج بدست آمده با فرایند تبدیل متانول به الفین های سبک مقایسه شده است.

## ۲. مکانیزم واکنش تبدیل متان به هیدروکربن های با ارزش در غیاب کاتالیزور

خاکدامن و همکارانش واکنش تبدیل متان به هیدروکربن های با ارزش در غیاب کاتالیزور را بررسی کردند. مکانیزم پیشنهادی آنها شامل متان و اکسیژن به عنوان واکنش دهنده و اتان، اتیلن، مونوکسید کربن، دی اکسید کربن، اکسیژن و متان به عنوان مواد خروجی از راکتور است و معادله سرعت و پارامترهای مورد نیاز برای واکنش دهنده ها و محصولات در رابطه (۱) و جدول ۱ آمده است [۶]:

$$r_i = k_{O_i} \cdot \exp(-E_i / RT) \cdot (P_{CH_4})^{\alpha_i} \cdot (P_{O_2})^{\beta_i} \quad (1)$$

$r_i : (mol / min^{-1} \cdot cm^{-3})$

$r_i$  سرعت تشکیل یا از بین رفتن مواد است.

جدول ۱ : پارامترهای مربوط به معادله سرعت واکنش دهنده‌ها و محصولات [۶].

جزء (i)	ثابت سرعت ( $k_{oi}$ )	انرژی فعالسازی ( $E_i$ ) (j/kmol)	توان متان ( $\alpha_i$ )	توان اکسیژن ( $\beta_i$ )
متان	$6/5e+7$	$2/271912e+8$	$0/53$	$1/59$
اتان	$3/7e+5$	$2/192416e+8$	$0/65$	$1/25$
اتیلن	$4/5e+6$	$2/104552e+8$	$0/38$	$1/90$
مونوکسیدکربن	$7/9e+10$	$2/589896e+8$	$0/70$	$4/51$
دی‌اکسیدکربن	$2/4e-1$	$2/179864e+8$	$0/2$	$2/53$

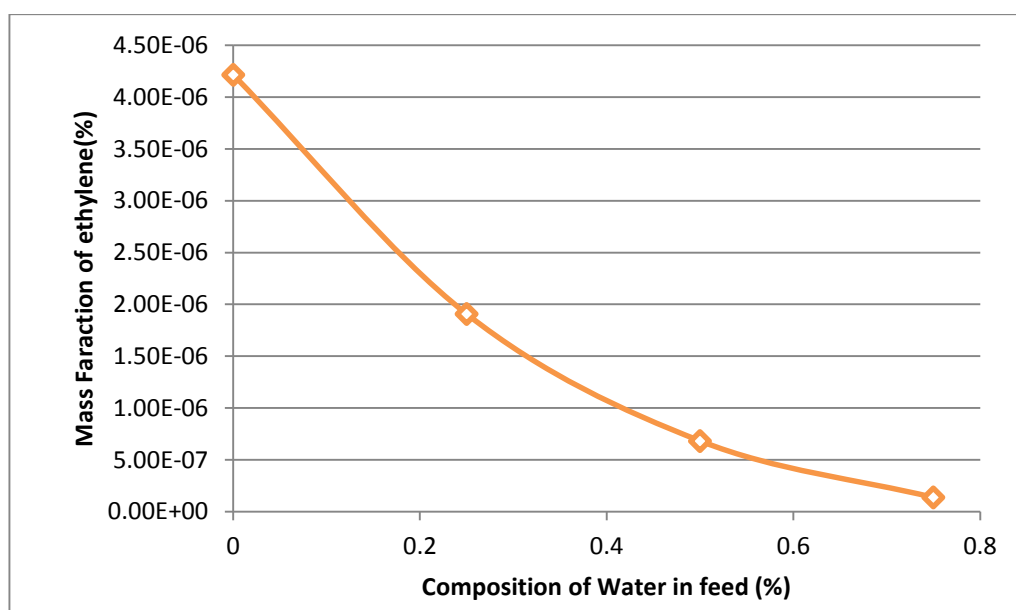
### ۳. مدل‌سازی فرایند و نتایج

هندسه دو بعدی راکتور به طول ۵ متر و قطر ۲۰ سانتی‌متر در گمبیت با شرایط مرزی جرم ورودی، دیواره و فشار خروجی طراحی در فلونت فراخوانی شد. واکنش تبدیل متان و اکسیژن به اتان، اتیلن، مونوکسیدکربن و دی‌اکسیدکربن در دماهای ۹۷۳/۱۵، ۱۰۷۳/۱۵ و ۱۱۷۳/۱۵ کلوین در نسبت  $CH_4/O_2 = 0/5$ ، ۱ و ۲ بررسی شد که نتایج در صد جرمی اتیلن در جدول ۲ آمده است. با افزایش نسبت  $CH_4/O_2$  در دمای ثابت، گزینش پذیری اتیلن تغییر چندانی پیدا نمی‌کند ولی افزایش دما اثر قابل ملاحظه‌تری بر بازده اتیلن دارد به طوری که افزایش دما مقدار اتیلن تولیدی را افزایش می‌دهد.

جدول ۲ : درصد جرمی اتیلن در دماها و نسبت واکنش دهنده‌های متفاوت.

Temperature(K)	۹۷۳/۱۵	۱۰۷۳/۱۵	۱۱۷۳/۱۱۵
( $CH_4/O_2$ ratio)			
۰/۵	$5/40346e-8$	$5/88836e-7$	$4/21261e-6$
۱	$3/84322e-8$	$3/54368e-7$	$2/52524e-6$
۱/۵	$2/15215e-8$	$2/34145e-7$	$1/69047e-6$

در این مدل‌سازی، میزان تبدیل متان به هیدروکربن‌ها بسیار پایین است. در دمای ۱۱۷۳/۱۵ کلوین و نسبت ۰/۵ از متان به اکسیژن، ترکیب آب در خوراک بررسی شده است و نتایج تاثیر ترکیب آب در خوراک بر بازده اتیلن در شکل ۱ نشان داده شده است. ترکیب آب در خوراک موجب کاهش بازده هیدروکربنی می‌شود. در شرایط ذکر شده گزینش‌پذیری اتیلن با سایر محصولات در شکل ۲ نشان داده شده است که اتیلن بیشترین بازده را دارد.

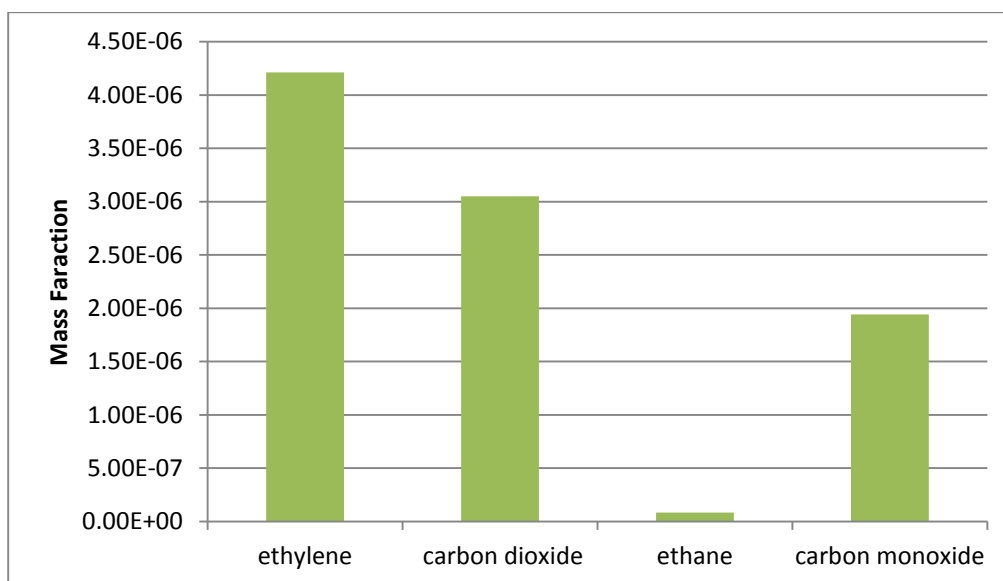


شکل ۱: بازده اتیلن برای مقادیر مختلف آب در خوراک.

#### ۴. مقایسه نتایج بدست آمده با فرایند تبدیل متانول به الفین‌های سبک

با توجه به نتایج بدست آمده از مدل‌سازی، می‌توان نشان داد که مقدار هیدروکربن‌های تولیدی از جمله اتیلن بسیار ناچیز است همچنین با وجود اینکه با افزایش دما مقدار آن افزایش می‌یابد ولی تامین دماهای بالا برای فرایند هزینه‌بر است. از طرفی هزینه‌ی زیادی هم برای انتقال متان باید اختصاص داده شود. در فرایند تبدیل متانول به الفین‌های سبک اتیلن جزء محصولاتی است که مقدار زیادی از آن تولید می‌شود. در MTO علاوه بر اتیلن، پروپیلن نیز تولید می‌شود که با توجه به افزایش تقاضا برای پروپیلن در خاورمیانه و

تولید بسیار کمتر پروپیلن نسبت به اتیلن در کشور ما، این فرایند برای تولید الفین‌های سبک مناسب نمی‌باشد. همچنین متانول یک خوراک مایع است و هزینه انتقال آن نسبت به گاز کمتر است.



شکل ۲: بازده محصولات در دمای ۱۱۷۳/۱۵ کلوین برای تبدیل متان.

## ۵. نتیجه‌گیری

- افزایش دما بازده اتیلن را افزایش داده و موجب صرف انرژی زیاد برای تولید اتیلن می‌شود.
- با افزایش نسبت  $CH_4/O_2$  بازده اتیلن کاهش می‌یابد.
- ترکیب آب در خوراک، بازده هیدروکربنی را کاهش می‌دهد.
- فرایند تبدیل متانول به الفین‌های سبک کم‌هزینه‌تر از تبدیل متان به اتیلن است و بازده آن نسبت به الفین‌های سبک بیشتر است.
- با توجه به اهمیت پروپیلن در خاورمیانه، با تولید پروپیلن از متانول در مقایسه با متان می‌توان هزینه‌های تولید این الفین را کاهش داد.

## مراجع

- [1] A.S. Al-Dughaither, H. de Lasa, Fuel 138 (2014) 52-64.
- [2] M. Stocker, Microporous . Mesoporous Mater. (1998).
- [3] M. Asadullah, S.-i. Ito, K. Kunimori, M. Yamada, K. Tomishige, J. Catal. R. 208 (2002) 255-259.
- [4] M. .Daneshpayeh, Abbasali.Khodadadi ,Navid.Mostoufi, Yadolah.Mortazavi, Rahmate.Sotudeh-Gharebagh, Alireza.Talebizadeh, Fuel Process. Technol. (2008).
- [5] C. Liu, A.Marafee, B.Hill, R.Mallinson, L.Lobban, Ind.Eng.Chem.Res 35 (1996) 3295-3301.
- [6] حمیدرضا.خاکدامن, ناصر.سیدمتین, رامین.خودآفرین, نشریه دانشکده مهندسی. سال چهاردهم. شماره دوم (۱۳۸۱).