



دانشگاه آزاد اسلامی

واحد تهران جنوب

دانشکده تحصیلات تکمیلی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد "M.Sc"

مهندسی شیمی - فرآیند

عنوان :

مدلسازی سنتز مستقیم دی متیل اتر از گاز سنتز دریک راکتور دوغابی

استاد راهنما :

استاد مشاور :

نگارش:

فهرست

۱	چکیده
۲	مقدمه
۳	افصل اول - کلیات
۴	۱- خواص فیزیکی و شیمیایی دی متیل اتر
۷	۲-۱ کاربردهای DME
۷	۱-۲-۱ Power Plant DME
۷	۲-۲-۱ LPG DME
۷	۳-۲-۱ Diesel Oil DME
۸	۳-۱ روش‌های تولید DME
۸	۱-۳-۱ روش تجاری (آبگیری از متانول)
۹	۲-۳-۱ تولید همزمان متانول و DME
۱۰	۳-۳-۱ تولید مستقیم DME از گاز سنتز
۱۳	۴-۳-۱ سنتز از گاز DME CO ₂
۱۴	۵-۳-۱ فرآیند تولید دی متیل اتر در فاز مایع
۱۶	۶-۳-۱ فرآیند تولید DME از زغال سنگ
۱۸	۴-۱ کاتالیزورهای فرایند DME
۱۸	۱-۴-۱ کاتالیزورهای فرایند سنتز DME از متانول
۲۲	۲-۴-۱ کاتالیزورهای فرایند سنتز DME از گاز سنتز
۲۸	۵-۱ وضعیت تولید دی متیل اتر
۲۸	۱-۵-۱ تولید دی متیل اتر در دنیا
۲۹	۲-۵-۱ تولید دی متیل اتر در ایران
۲۹	۶-۱ فرایندهای سنتز DME

۲۹	فرایند تولید DME از متانول.....	۱-۶-۱
۳۰	شرح فرایند تولید DME از متانول.....	۲-۶-۱
۳۴	فرایند سنتز یک مرحله ای تولید DME از گاز سنتز.....	۳-۶-۱
۳۵	شرح فرایند سنتز یک مرحله ای تولید DME از گاز سنتز.....	۴-۶-۱
۴۱.....	۲ فصل دوم - رآکتور دوغابی	
۴۲	۱-۲ کاربردهای رآکتور دوغابی.....	
۴۸	۲-۲ طراحی رآکتور دوغابی.....	
۵۴.....	جداسازی مقاومت‌ها.....	۱-۲-۲
۵۷.....	ضریب جذب گاز	۲-۲-۲
۵۹	۳-۲ رآکتورهای بستر ثابت	
۵۹	۴-۲ رآکتورهای Trickle- Bed	
۶۰	۵-۲ رآکتور های بستر پر شده	
۶۰	۶-۲ مقایسه رآکتور دوغابی و رآکتور بستر ثابت	
۶۲.....	۳ فصل سوم- سینتیک مناسب برای تولید دی متیل اتر.....	
۷۳.....	۴ فصل چهارم- مدل‌سازی و نتایج	
۷۴.....	۱-۴ تئوری.....	
۷۵	۲-۴ روش متوسط رینولوز.....	
۷۶.....	۳-۴ مدل‌های توربولانس.....	
۷۹.....	۴-۴ مدل $k - \epsilon$	
۸۱	۵-۴ معادلات دینامیک سیالات پیشرفتہ	
۸۳	۶-۴ الگوریتم حل معادلات	
۸۳	۱-۶-۴ ابعاد مدل و شبکه بندی منطقه حل.....	

۲-۶-۴	شرایط مرزی و مشخصات منطقه حل.....	۸۴
۳-۶-۴	فرضیات حل مسئله و ایجاد مدل.....	۸۶
۷-۴	۷- استقلال از شبکه و اعتبارسنجی دادهها	۸۸
۱-۷-۴	استقلال از شبکه	۸۸
۲-۷-۴	مقایسه نتایج حالت عددی و آزمایشگاهی	۸۹
۴-۸	۸- تاثیر تغییرات دما بر نتایج	۹۴
۱-۸-۴	تغییرات غلظت مواد مختلف در امتداد رآکتور در دماهای متفاوت.....	۹۴
۴-۹	۹- بررسی تاثیر افزایش طول رآکتور بر عملکرد آن.....	۹۷
۴-۱۰	۱۰- کانتور غلظت مواد مختلف در رآکتور	۱۰۰
۴-۱۱	۱۱- سرعت واکنشهای متفاوت.....	۱۰۱
۴-۱۲	۱۲- کانتور فشار نسبی در طول رآکتور	۱۰۴
۴-۱۳	۱۳- جمع بندی.....	۱۰۴
۴-۱۴	۱۴- پیشنهادات برای تحقیقات آتی	۱۰۵
۵	۵- مراجع.....	۱۰۶
۶	۶- چکیده لاتین	۱۰۹

فهرست جداول

۱-۱ خواص دی متیل اتر.....	۴
۲-۱ خواص DME در مقایسه با سایر سوختها	۶
۳-۱ مقایسه فرآیندهای تولید دی متیل اتر	۱۶
۴-۱ آبگیری متابول بر روی کاتالیزور $Al_2O_3 - \gamma$ مرجع و تقویت شده.....	۲۱
۵-۱ مشخصات جریانهای فرایندی سنتز دو مرحله ای DME	۳۳
۶-۱ پارامترهای سینتیک ارائه شده توسط Ng و همکاران	۶۶
۷-۱ پارامترهای سینتیک تصحیح شده Lee و همکاران.....	۶۸
۸-۱ پارامترهای سینتیک ارائه شده توسط Zhaoguang Nie و همکاران	۶۹
۹-۱ پارامترهای سینتیک ارائه شده توسط Wen-Zi و همکاران	۷۲
۱۰-۱ متغیرها در معادله کلی انتقال	۸۲
۱۱-۱ مشخصات سیال فاز مایع درون راکتور kerosene	۸۷
۱۲-۱ مشخصات فیزیکی مواد.....	۸۷
۱۳-۱ معادلات سرعتهای واکنش‌ها به صورت آرنیوسی.....	۸۸
۱۴-۱ معادلات سرعتهای واکنش‌ها به صورت آرنیوسی.....	۸۸

فهرست اشکال

۱-۱	نمایی از فرایند تولید DME با استفاده از فرایندا بگیری از متانول	۹.
۱-۲	نمایی از فرایند تولید همزمان DME و متانول	۱۰.
۱-۳	فرایند تولید DME شرکت Toyo	۱۲.
۱-۴	راکتور دوغابی شرکت Air Products	۱۵.
۱-۵	دیاگرام جریان فرآیندی واحد تولید DME از زغال سنگ	۱۷.
۱-۶	شمایتیکی از دیاگرام جریان فرآیندی واحد سنتز مستقیم DME شرکت JFE	۲۹.
۱-۷	واحد تولید DME از زغال سنگ با ظرفیت ۵ تن در روز	۱۸.
۱-۸	اثر میزان Cu بر فرایند هیدروژناسیون CO	۲۰.
۱-۹	واکنش آبگیری متانول را در دماهای مختلف بر روی $\text{SiO}_2/\gamma - \text{Al}_2\text{O}_3$ و $\gamma - \text{Al}_2\text{O}_3$	۲۳.
۱-۱۰	اثر آب بر فرایند آبگیری از متانول بر روی کاتالیزور $\gamma - \text{Al}_2\text{O}_3$	۲۴.
۱-۱۱	اثر بر فرایند آبگیری از متانول بر روی کاتالیزور $\gamma - \text{Al}_2\text{O}_3$	۲۵.
۱-۱۲	میزان تبدیل متانول بر روی HZSM-5 و Na-ZSM-5 در فشار اتمسفریک	۲۷.
۱-۱۳	نمودار جریان فرایندی تولید DME از متانول	۲۲.
۱-۱۴	تبدیل تعادلی گاز سنتز به متانول بصورت تابعی از ترکیب کاتالیزور	۳۶.
۱-۱۵	تبدیل تعادلی گاز سنتز بصورت تابعی از ترکیب گاز سنتز	۳۷.
۱-۱۶	نمودار جریان فرایندی واحد یک مرحله ای سنتز DME	۳۹.
۱-۱۷	راکتور ستون حبابدار دوغابی برای تولید متانول	۴۵.
۱-۱۸	راکتور حلقه ای خط لوله برای تولید پلی اتیلن	۴۶.
۱-۱۹	راکتور دوغابی حلقه ای گردشی برای سیستم های شیمیایی	۴۶.
۱-۲۰	راکتور دوغابی حلقه ای گردشی بدون پمپ	۴۷.
۱-۲۱	پروفایل غلظت برای هیدروژنه کردن کاتالیستی	۵۵.
۱-۲۲	نمودارهای دو جانبه برای هیدروژنه کردن کاتالیستی	۶۰.
۱-۲۳	ضرایب جذب گاز برای هیدروژن در راکتور های همزده	۶۰.

۷-۲ ضرایب جذب گاز برای هیدروژن در رآکتور های همزده.....	۶۰
۱-۴ مش بندی رآکتور.....	۷۴
۲-۴ شماتیکی از هندسه مسئله و شرایط مرزی	۷۵
۳-۴ بررسی استقلال حل از شبکه بندی برای غلظت در طول رآکتور.....	۸۸
۴-۴ مقایسه نتایج آزمایشگاهی و عددی تبدیل CO در دماهای ۲۸۰-۲۲ درجه سانتیگراد در فشار ۲۵ بار	۹۰
۵-۴ مقایسه نتایج آزمایشگاهی و عددی گرینش پذیری DME در دماهای ۲۸۰-۲۲۰ درجه سانتیگراد ...	۹۱
۶-۴ مقایسه نتایج آزمایشگاهی و عددی تبدیل CO در فشارهای ۲۵ تا ۴۰ بار در دمای ۲۵۰ درجه سانتیگراد.....	۹۲
۷-۴ مقایسه نتایج آزمایشگاهی و عددی انتخاب پذیری DME در فشارهای متفاوت.....	۹۲
۸-۴ تغییرات غلظت دی متیل اتر در امتداد رآکتور روی خط مرکزی در دماهای ۲۸۰-۲۲۰ درجه سانتیگراد	۹۴
۹-۴ تغییرات غلظت هیدروژن در امتداد رآکتور روی خط مرکزی در دماهای ۲۸۰-۲۲۰ درجه سانتیگراد ...	۹۵
۱۰-۴ تغییرات غلظت منواکسید کربن در امتداد رآکتور روی خط مرکزی در دماهای ۲۸۰-۲۲۰ درجه سانتیگراد.....	۹۵
۱۱-۴ تاثیر افزایش طول رآکتور بر تولید DME در دمای ۲۲۰ درجه سانتیگراد و فشار ۲۵ بار	۹۶
۱۲-۴ تاثیر افزایش طول رآکتور بر مقدار خروجی CO در دمای ۲۲۰ درجه سانتیگراد و فشار ۲۵ بار	۹۷
۱۳-۴ تاثیر افزایش طول رآکتور بر گرینش پذیری در دمای ۲۲۰ درجه سانتیگراد و فشار ۲۵ بار	۹۷
۱۴-۴ تاثیر افزایش طول رآکتور بر تبدیل CO در دمای ۲۲۰ درجه سانتیگراد و فشار ۲۵ بار	۹۸
۱۵-۴ غلظت CO در دمای ۲۴۰ درجه سانتیگراد و دبی ۲۰۰ میلی لیتر و فشار ۳۵ بار	۹۹
۱۶-۴ غلظت H ₂ در دمای ۲۴۰ درجه سانتیگراد و دبی ۲۰۰ میلی لیتر و فشار ۳۵ بار	۹۹
۱۷-۴ غلظت DME در دمای ۲۴۰ درجه سانتیگراد و دبی ۲۰۰ میلی لیتر و فشار ۳۵ بار	۱۰۰
۱۸-۴ سرعت واکنش ۱ در طول رآکتور در دمای ۲۴۰ درجه سانتیگراد و دبی ۲۰۰ میلی لیتر و فشار ۳۵ بار	۱۰۱
۱۹-۴ سرعت واکنش ۲ در طول رآکتور در دمای ۲۴۰ درجه سانتیگراد و دبی ۲۰۰ میلی لیتر و فشار ۳۵ بار	۱۰۱
۲۰-۴ سرعت واکنش ۳ در طول رآکتور در دمای ۲۴۰ درجه سانتیگراد و دبی ۲۰۰ میلی لیتر و فشار ۳۵ بار	۱۰۲
۲۱-۴ سرعت واکنش ۴ در طول رآکتور در دمای ۲۴۰ درجه سانتیگراد و دبی ۲۰۰ میلی لیتر و فشار ۳۵ بار	۱۰۲
۲۲-۴ کانتور فشار نسبی در طول رآکتور	۱۰۳

چکیده:

سنتز مستقیم دی متیل اتر (DME) از گاز سنتز به شدت گرمایی است، بنابراین کنترل دما جهت تولید این ماده و همچنین روش مناسب انتقال حرارت در موقعيت چنین فرآيندی باید مورد توجه قرار گیرد. تحقیقات نشان داده است که راکتور دوغابی به دلیل داشتن ویژگی های مناسب انتقال حرارت و جرم، مناسبترین نوع در مقایسه با راکتورهای دیگر میباشد. در این تحقیق یک مدل ریاضی برای سنتز مستقیم DME از گازسنتز در یک راکتور دوغابی با سیکل سینتیکی کامل، شامل مصرف CO، واکنش انتقال آب-گاز و آبگیری متناول، توسعه داده و مورد ارزیابی واقع شده است. این مدلسازی به کمک نرم افزار FLUENT، طبق مدل $\epsilon - k$ با ۱۰٪ شدت آشفتگی (مقدار صنعتی) انجام شده است. تاثیر پارامترهای فشار (۲۵ تا ۴۰ بار) و دما ($220^{\circ}C - 280^{\circ}C$) در شدت جریان خوراک ۲۰۰ میلی لیتر در دقیقه و با نسبت جرمی یکسان از ترکیب CO و H_2 بر میزان تبدیل CO و گزینش پذیری تولید DME بررسی شده است. مقایسه نتایج بدست آمده برای تبدیل CO و گزینش پذیری تولید DME از مدل جاری با نتایج تجربی، نشان میدهد که در هر دو مورد حداکثر خطا کمتر از ۱۱٪ می باشد.

كلمات کلیدی: دی متیل اتر، سنتز مستقیم، گاز سنتز، راکتور دوغابی، مدلسازی