



## دانشگاه آزاد اسلامی

واحد تهران جنوب

دانشکده تحصیلات تکمیلی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد (M.Sc)

مهندسی شیمی - فرآیند

عنوان:

مدلسازی ریاضی راکتور بستر ثابت تبدیل مستقیم متان به متanol با کمک دینامیک سیال  
(CFD) محاسباتی

استاد راهنما :

استاد مشاور :

نگارش :

## فهرست

۱.....	چکیده
۲	فصل اول - تولید مтанول از گاز طبیعی: تاریخچه و اهمیت
۳.....	۱-۱ مقدمه
۸ .....	۱-۲ فرایند های تولید مтанول
۱۲	فصل دوم - مطالعات کتابخانه ای
۱۳.....	۱-۲ راکتور و کاتالیست
۱۳.....	الف) راکتور بستر ثابت کاتالیستی
۲۲.....	ب) راکتور بستر ثابت غیر کاتالیستی
۲۵.....	ج) راکتور بستر متحرک
۲۶.....	د) راکتورهای دیگر
۲۸.....	۲-۱ انجام واکنش در فاز همگن
۳۳.....	۲-۲ سینتیک واکنش
۳۹	فصل سوم - مدلسازی
۴۰.....	۳-۱ مدلسازی انواع راکتور استفاده شده برای فرایند تبدیل مستقیم متان به مтанول
۴۰.....	الف) مدلسازی راکتور بستر ثابت کاتالیستی
۴۱.....	ب) مدلسازی راکتور با جریان توپی
۴۲.....	ج) مدلسازی راکتورهای دیگر
۴۳.....	۲-۳ مکانیسم واکنش
۴۵.....	۳-۳ روش های حل عددی
۴۶.....	۴-۳ روش متوسط رینولدز

۳-۵ مدل های توربولانس	۴۷
الف) مدل های صفر معادله ای	۴۹
ب) مدل های تک معادله ای	۴۹
ج) مدل های دو معادله ای	۴۹
د) مدل بسته مرتبه دوم	۴۹
۳-۶ مدل $\epsilon - k$	۵۰
الف) معادلات انتقال برای مدل $\epsilon - k$ استاندارد	۵۰
ب) مدل نمودن ویسکوزیته مغشوش	۵۱
۳-۷ مدلسازی بستر های ثابت	۵۲
۳-۸ مشکلات ابتدایی در مدلسازی بسترها ثابت	۵۲
۳-۹ مدلسازی به صورت دینامیک سیالات محاسباتی	۵۴
۳-۱۰ معادلات حاکم بر مدلسازی	۵۵
الف) معادله مومنتوم	۵۵
ب) معادله پیوستگی	۵۶
ج) معادله بقا برای اجزا شیمیایی	۵۷
۳-۱۱ الگوریتم حل معادلات	۵۹
۱۱-۱ ابعاد مدل و شبکه بنده منطقه حل	۵۹
۱۱-۲ شرایط مرزی و مشخصات منطقه حل	۶۱
۱۱-۳ فرضیات حل مسئله	۶۲
۱۲-۱ استقلال از شبکه و اعتبار سنجی داده ها	۶۵
۱۲-۲ استقلال از شبکه	۶۵
۱۲-۳ نتایج مدل و مقایسه اطلاعات آزمایشگاهی	۶۶
الف) اثر افزایش دما بر رصد تبدیل متان و گزینش پذیری تولید محصولات	۶۷
ب) اثر گذشت زمان بر رصد تبدیل متان و جزء مولی متانول	۷۰
ج) اثر افزایش فشار بر رصد تبدیل متان و گزینش پذیری تولید محصولات	۷۳
د) استفاده از هوا به جای اکسیژن خالص جهت اکسیداسیون مستقیم متان	۷۷

۷۹.....	۱۳-۳ واکنش کنترل کننده.....
۸۱	<b>فصل چهارم-جمع بندی و پیشنهادات</b>
۸۲.....	۱-۴ جمع بندی.....
۸۴.....	۲-۴ پیشنهادات.....
۸۵.....	<b>مراجع.....</b>
۸۹.....	<b>چکیده لاتین.....</b>

## فهرست جداول

۱-۱ جایگاه مтанول در بازار محصولات شیمیایی.....	۵
۱-۲ مقایسه گزینش پذیری با استفاده از کاتالیست های مختلف نسبت به آکنه خنثی.....	۱۷
۲-۱ نتایج آزمایش های اکسیداسیون متان در $465^{\circ}\text{C}$ و $6/2 \text{ bar}$ با استفاده از آکنه خنثی .....	۲۴
۲-۲ پارامترهای مدل سینتیکی واکنش.....	۴۴
۲-۳ پارامترهای به کار رفته جهت حل معادلات.....	۴۴
۳-۱ مشخصات فاز گاز ورودی به میکروراکتور.....	۶۳
۳-۲ مشخصات فیزیکی مواد.....	۶۴
۳-۳ معادلات سرعت های واکنش به صورت آرینوسی.....	۶۵

## فهرست اشکال

۱-۱	مقادیر عرضه و تقاضای مтанول در جهان.....	۷
۲-۱	شمای کلی فرایند ICI .....	۹
۳-۱	شمای کلی فرایند lurgi .....	۱۰
۴-۱	شمای کلی فرایند Nissui-Topsoe .....	۱۰
۵-۱	شمای کلی فرایند Mitsubishi .....	۱۱
۱-۲	راکتور بستر ثابت ساسول .....	۱۴
۲-۲	راکتوربستر سیال ثابت.....	۱۴
۳-۲	وابستگی درصد تبدیل و گزینش پذیری به زمان اقامت.....	۲۲
۴-۲	وابستگی درصد تبدیل و گزینش پذیری به دمای عملیاتی.....	۲۳
۵-۲	وابستگی درصد تبدیل و گزینش پذیری به فشار عملیاتی.....	۲۳
۱-۳	شکل راکتور در Gambit .....	۶۰
۲-۳	مش بندی راکتور.....	۶۰
۳-۳	شماییکی از هندسه مسئله و شرایط مرزی.....	۶۲
۴-۳	بررسی استقلال حل از شبکه بندی برای درصد تبدیل متان در دماهای مختلف.....	۶۶
۵-۳	تغییرات درصد مولی متان با دما در فشار ۵۰ بار و زمان ماند ۳ ثانیه .....	۶۸
۶-۳	تغییرات درصد گزینش پذیری متانول با دما در فشار ۵۰ بار و زمان ماند ۳ ثانیه.....	۶۹
۷-۳	تغییرات درصد گزینش پذیری CO با دما در فشار ۵۰ بار و زمان ماند ۳ ثانیه.....	۶۹
۸-۳	تغییرات درصد گزینش پذیری $\text{CO}_2$ با دما در فشار ۵۰ بار و زمان ماند ۳ ثانیه .....	۷۰
۹-۳	تغییرات درصد تبدیل متان با زمان در دمای ${}^{\circ}\text{C}$ ۵۰۰ و فشار ۵۰ بار.....	۷۱
۱۰-۳	تغییرات جزء مولی متانول با زمان در دمای ${}^{\circ}\text{C}$ ۵۰۰ و فشار ۵۰ بار.....	۷۱
۱۱-۳	کانتور جزء مولی متان در دمای ${}^{\circ}\text{C}$ ۵۰۰ و فشار ۵۰ بار.....	۷۲
۱۲-۳	کانتور جزء مولی متانول در دمای ${}^{\circ}\text{C}$ ۵۰۰ و فشار ۵۰ بار.....	۷۲
۱۳-۳	تغییرات درصد تبدیل متان با فشار در دمای ${}^{\circ}\text{C}$ ۵۰۰ و زمان ماند ۳ ثانیه.....	۷۴

۱۴-۳	تغییرات گزینش پذیری تولید $\text{CO}_2$ با فشار در دمای $500^{\circ}\text{C}$ و زمان ماند ۳ ثانیه.....	۷۴
۱۵-۳	تغییرات گزینش پذیری تولید متانول با فشار در دمای $500^{\circ}\text{C}$ و زمان ماند ۳ ثانیه .....	۷۵
۱۶-۳	تغییرات گزینش پذیری تولید $\text{CO}$ با فشار در دمای $500^{\circ}\text{C}$ و زمان ماند ۳ ثانیه.....	۷۵
۱۷-۳	کانتور جزء مولی $\text{CO}$ در دمای $500^{\circ}\text{C}$ و فشار ۱۲۰ بار.....	۷۶
۱۸-۳	کانتور جزء مولی $\text{CO}_2$ در دمای $500^{\circ}\text{C}$ و فشار ۱۲۰ بار.....	۷۶
۱۹-۳	تغییرات درصد تبدیل متان با دما در حضور هوا در فشار ۵بار.....	۷۷
۲۰-۳	تغییرات درصد گزینش پذیری متانول با دما در حضور هوا در فشار ۵بار.....	۷۸
۲۱-۳	تغییرات درصد گزینش پذیری متانول با فشار در حضور هوا در دمای $500^{\circ}\text{C}$ .....	۷۸
۲۲-۳	تغییرات درصد گزینش پذیری متان با فشار در حضور هوا در دمای $500^{\circ}\text{C}$ .....	۷۹
۲۳-۳	سرعت واکنش اول در طول راکتور در دمای $500^{\circ}\text{C}$ و فشار ۵بار.....	۸۰

## چکیده

اکسیداسیون کاتالیستی مستقیم متان به متنالو به منظور تولید سوخت های مایع و محصولات پتروشیمی از گاز طبیعی حائز اهمیت است. در این رساله ، یک مدل ریاضی برای سنتز مستقیم متان به متنالو به کمک اکسیژن خالص در یک راکتور بستر ثابت پر شده از دانه های کاتالیست  $V_2O_5/SiO_2$  توسعه داده شده و مورد ارزیابی واقع شده است. این مدلسازی به کمک نرم افزار FLUENT، طبق مدل  $k-E$  با ۱۰٪ شدت آشفتگی (مقدار صنعتی) انجام شده است. تاثیر پارامترهای فشار (۱۲۰ تا ۴۵۰ بار) و دما (۵۰۰ تا ۶۰۰°C) و زمان ماند ۳ ثانیه بررسی شده است. همچنین ، از اکسیژن خالص به عنوان عامل اکسید کننده استفاده شد و غلظت اکسیژن در خوراک ۵ درصد مولی نسبت به متان انتخاب گردید و در گام بعدی به جای اکسیژن خالص از هوا استفاده شد. نتایج حاصل از مدلسازی در هر دو حالت حاکی از آن است که با افزایش درصد تبدیل متان ، گزینش پذیری تولید متنالو کاهش می یابد. همچنین اثر تغییرات دما ، فشار بر درصد تبدیل متان و گزینش پذیری تولید محصولات بررسی شده که با نتایج تجربی محققان دیگر تطابق مناسبی را نشان می دهد. ( در هر دو مورد حداقل خطا کمتر از ۵٪ می باشد).

**کلمات کلیدی :** متان، متنالو، سنتز مستقیم، راکتور بستر ثابت، مدلسازی ریاضی