



دانشگاه آزاد اسلامی
واحد تهران جنوب
دانشکده تحصیلات تکمیلی

پایان نامه جهت دریافت درجه کارشناسی ارشد " M.SC "
مهندسی شیمی - طراحی فرآیندهای نفت

عنوان :

مدلسازی ریاضی راکتورهای شعاعی جهت تولید استایرین

استاد راهنما :

استاد مشاور :

نگارش :

فهرست مطالب

<u>صفحه</u>	<u>عنوان</u>
	چکیده
۱	مقدمه
	فصل اول
	شناخت و معرفی استایرن
۳	۱-۱- خصوصیات فیزیکی
۳	۲-۱- خواص شیمیایی
۶	۳-۱- کاربرد استایرن
۷	
	فصل دوم
	تولید استایرن
۹	۱-۲- هیدروژن گیری از اتیل بنزن
۹	۱-۱-۲- مکانیسم واکنش
۹	۲-۱-۲- هیدروژن گیری آدیاباتیک
۱۱	۳-۱-۲- هیدروژن گیری تکدما
۱۳	۴-۱-۲- تهیه استایرن به روش شرکت DOW
۱۴	۵-۱-۲- هیدروژن زدایی در حضور اکسیژن
۱۵	۲-۲- فرایند استایرن و اکسید پروپیلن
۱۶	۳-۲- تولید استایرن با استفاده از بوتادی ان
۱۷	۴-۲- تولید استایرن با استفاده از تولوئن
۱۸	۵-۲- روشهای دیگر
۱۹	۶-۲- تقطیر استایرن
۲۰	۷-۲- پلیمریزاسیون استایرن
۲۳	
	فصل سوم
	کلیات راکتور
۲۵	۱-۳- راکتور هیدروژن گیری از اتیل بنزن
۲۵	

۲۵	۳-۱-۱- شکل ظاهری
۲۶	۳-۱-۲- کاتالیست
۲۸	۳-۱-۳- ماده گرم کننده
۲۹	۳-۱-۴- خوراک ورودی به راکتور
۳۰	۳-۱-۵- افت فشار
۳۱	۳-۲- فرضیات بکار برده شده

فصل چهارم

۳۳	مدلسازی و یافتن معادلات حاکم
۳۳	۴-۱- واکنشها و سینتیک آنها
۳۵	۴-۲- یافتن معادلات حاکم بر قرص کاتالیست
۳۸	۴-۳- یافتن معادلات حاکم بر راکتور

فصل پنجم

۴۹	حل معادلات دیفرانسیلی
۴۹	۵-۱- حل معادلات حاکم بر بستر کاتالیست
۵۱	۵-۲- حل معادلات حاکم بر قرص های کاتالیست
۵۵	۵-۳- پارامترهای هندسی راکتور
	۵-۴- دبی مولی خوراک ورودی به راکتور
۵۷	۵-۴-۱- دبی مولی خوراک ورودی به راکتور در دمای ۸۰۰ درجه کلوین
۵۸	۵-۴-۲- دبی مولی خوراک ورودی به راکتور در دمای ۸۱۰ درجه کلوین
۶۰	۵-۴-۳- دبی مولی خوراک ورودی به راکتور در دمای ۸۲۰ درجه کلوین

فصل ششم

۶۳	نتایج حاصل از حل معادلات
۱۲۹	مقایسه نتایج بدست آمده با نتایج موجود در مراجع

فصل هفتم

نتیجه گیری و جمع بندی نهایی

۱۳۳	
۱۳۳	۱-۷- نتایج حاصل از تغییرات شعاع قرص های کاتالیست
۱۳۴	۲-۷- نتایج حاصل از تغییرات دمای ورودی واکنشگرها
۱۳۵	۳-۷- نحوه تغییرات عامل تاثیر در جهت شعاع راکتور
۱۳۷	۴-۷- نتایج تغییرات فشار
۱۳۸	۵-۷- جمع بندی نهایی
۱۳۹	نظرات و پیشنهادات
۱۴۰	فهرست علائم
۱۴۲	منابع و مراجع
۱۴۵	ضمیمه (برنامه نوشته شده با استفاده از نرم افزار Matlab)

فهرست نمودارها

صفحه

عنوان

- شکل (۱-۶) : تأثیر تغییرات دما بر روی تغییرات دبی مولی اتیل بنزن در جهت شعاع راکتور بر روی کاتالیست اکسید آهن در شعاع $1/175 \times 10^{-3}$ متری از کاتالیست ها در قسمت هموزن
- ۶۴
- شکل (۲-۶) : تأثیر تغییرات دما بر روی تغییرات دبی مولی اتیل بنزن در جهت شعاع راکتور بر روی کاتالیست اکسید آهن در شعاع $1/175 \times 10^{-3}$ متری از کاتالیست ها در قسمت هتروژن
- ۶۴
- شکل (۳-۶) : تأثیر تغییرات دما بر روی تغییرات دبی مولی اتیل بنزن در جهت شعاع راکتور بر روی کاتالیست اکسید آهن در شعاع $2/35 \times 10^{-3}$ متری از کاتالیست ها در قسمت هموزن
- ۶۵
- شکل (۴-۶) : تأثیر تغییرات دما بر روی تغییرات دبی مولی اتیل بنزن در جهت شعاع راکتور بر روی کاتالیست اکسید آهن در شعاع $2/35 \times 10^{-3}$ متری از کاتالیست ها در قسمت هتروژن
- ۶۵
- شکل (۵-۶) : تأثیر تغییرات دما بر روی تغییرات دبی مولی اتیل بنزن در جهت شعاع راکتور بر روی کاتالیست اکسید آهن در شعاع $4/70 \times 10^{-3}$ متری از کاتالیست ها در قسمت هموزن
- ۶۶
- شکل (۶-۶) : تأثیر تغییرات دما بر روی تغییرات دبی مولی اتیل بنزن در جهت شعاع راکتور بر روی کاتالیست اکسید آهن در شعاع $4/70 \times 10^{-3}$ متری از کاتالیست ها در قسمت هتروژن
- ۶۶
- شکل (۷-۶) : تأثیر تغییرات دما بر روی تغییرات دبی مولی استایرن در جهت شعاع راکتور بر روی کاتالیست اکسید آهن در شعاع $1/175 \times 10^{-3}$ متری از کاتالیست ها در قسمت هموزن
- ۶۸
- شکل (۸-۶) : تأثیر تغییرات دما بر روی تغییرات دبی مولی استایرن در جهت شعاع راکتور بر روی کاتالیست اکسید آهن در شعاع $1/175 \times 10^{-3}$ متری از کاتالیست ها در قسمت هتروژن
- ۶۸
- شکل (۹-۶) : تأثیر تغییرات دما بر روی تغییرات دبی مولی استایرن در جهت شعاع راکتور بر روی کاتالیست اکسید آهن در شعاع $2/35 \times 10^{-3}$ متری از کاتالیست ها در قسمت هموزن
- ۶۹
- شکل (۱۰-۶) : تأثیر تغییرات دما بر روی تغییرات دبی مولی استایرن در جهت شعاع راکتور بر روی کاتالیست اکسید آهن در شعاع $2/35 \times 10^{-3}$ متری از کاتالیست ها در قسمت هتروژن
- ۶۹
- شکل (۱۱-۶) : تأثیر تغییرات دما بر روی تغییرات دبی مولی استایرن در جهت شعاع راکتور بر روی کاتالیست اکسید آهن در شعاع $4/70 \times 10^{-3}$ متری از کاتالیست ها در قسمت هموزن
- ۷۰
- شکل (۱۲-۶) : تأثیر تغییرات دما بر روی تغییرات دبی مولی استایرن در جهت شعاع راکتور بر روی کاتالیست اکسید آهن در شعاع $4/70 \times 10^{-3}$ متری از کاتالیست ها در قسمت هتروژن
- ۷۰
- شکل (۱۳-۶) : تأثیر تغییرات دما بر روی تغییرات دبی مولی بنزن در جهت شعاع راکتور بر روی کاتالیست اکسید آهن در شعاع $1/175 \times 10^{-3}$ متری از کاتالیست ها در قسمت هموزن
- ۷۲
- شکل (۱۴-۶) : تأثیر تغییرات دما بر روی تغییرات دبی مولی بنزن در جهت شعاع راکتور بر روی کاتالیست اکسید آهن در شعاع $1/175 \times 10^{-3}$ متری از کاتالیست ها در قسمت هتروژن
- ۷۲

فهرست جداول

صفحه	عنوان
۴	جدول (۱-۱): برخی از خواص فیزیکی استایرن
۴	جدول (۲-۱): فشار بخار استایرن
۵	جدول (۳-۱): انحلال پذیری استایرن و آب (درصدها وزنی هستند)
۵	جدول (۴-۱): شاخص انکساری و چگالی استایرن
۵	جدول (۵-۱): اطلاعات ویسکوزیته، کشش سطحی و ظرفیت گرمای ویژه
۱۹	جدول (۱-۲): ظرفیت جهانی تولید استایرن
۲۰	جدول (۲-۲): ظرفیت تولید استایرن
۲۰	جدول (۳-۲): نمونه ای از استایرن خام بعد از هیدروژن زدایی
۴۳	جدول (۲-۴): ظرفیت گرمایی گازها در حالت گاز آرمانی $C_p^{ig}/R = A + BT$
۵۵	جدول (۱-۵): پارامترهای هندسی راکتور غیر آدیاباتیک
۵۶	جدول (۲-۵): جرم مولکولی اجزاء
۶۷	جدول (۱-۶): نحوه تغییرات دبی مولی اتیل بنزن در ورودی و خروجی راکتور
۷۱	جدول (۲-۶): نحوه تغییرات دبی مولی استایرن در ورودی و خروجی راکتور
۷۵	جدول (۳-۶): نحوه تغییرات دبی مولی بنزن در ورودی و خروجی راکتور
۷۹	جدول (۴-۶): نحوه تغییرات دبی مولی تولوئن در ورودی و خروجی راکتور
۸۳	جدول (۵-۶): نحوه تغییرات دبی مولی متان در ورودی و خروجی راکتور
۸۷	جدول (۶-۶): نحوه تغییرات دبی مولی اتیلن در ورودی و خروجی راکتور
۹۱	جدول (۷-۶): نحوه تغییرات دبی مولی هیدروژن در ورودی و خروجی راکتور
۹۳	جدول (۸-۶): نحوه تغییرات دبی مولی بخار آب در ورودی و خروجی راکتور
۹۷	جدول (۹-۶): نحوه تغییرات دبی مولی مونو اکسید کربن در ورودی و خروجی راکتور
۱۰۱	جدول (۱۰-۶): نحوه تغییرات دبی مولی دی اکسید کربن در ورودی و خروجی راکتور
۱۰۵	جدول (۱۱-۶): نحوه تغییرات دما در ورودی و خروجی راکتور
۱۰۹	جدول (۱۲-۶): نحوه تغییرات فشار در ورودی و خروجی راکتور
۱۱۱	جدول (۱۳-۶): نحوه تغییرات دمای بخار در ورودی و خروجی گرمکن حرارتی
۱۱۳	جدول (۱۴-۶): نحوه تغییرات عامل تأثیر واکنش اول در ورودی و خروجی راکتور

- ۱۱۵ جدول (۶-۱۵) : نحوه تغییرات عامل تأثیر واکنش دوم در ورودی و خروجی راکتور
- ۱۱۷ جدول (۶-۱۶) : نحوه تغییرات عامل تأثیر واکنش سوم در ورودی و خروجی راکتور
- ۱۲۰ جدول (۶-۱۷) : نحوه تغییرات عامل تأثیر واکنش چهارم در ورودی و خروجی راکتور
- ۱۲۲ جدول (۶-۱۸) : نحوه تغییرات عامل تأثیر واکنش پنجم در ورودی و خروجی راکتور
- ۱۲۴ جدول (۶-۱۹) : نحوه تغییرات عامل تأثیر واکنش ششم در ورودی و خروجی راکتور

چکیده

این پروژه به طراحی و شبیه سازی راکتور هیدروژن گیری از اتیل بنزن که منجر به تولید استایرن میگردد ، می پردازد. در آغاز به روشهای تولید استایرن پرداخته شده که یکی از مهمترین آنها هیدروژن گیری از اتیل بنزن می باشد که به صورتهای ، آدیباتیک و غیر آدیباتیک انجام می گیرد. راکتور غیر آدیباتیک جریان شعاعی برای هیدروژن گیری اتیل بنزن و تبدیل به استایرن پیشنهاد می شود. جریان شعاعی و ادامه گرمایش واکنشگرها (با استفاده از بخار سوپر هیت در گرمکن حرارتی) از خصوصیات جدید در این طراحی می باشند. بخار سوپر هیت در لوله های گرمکن حرارتی جریان دارد که لوله های گرمکن حرارتی هم از میان بستر کاتالیستی و در جهت شعاع راکتور عبور می کنند. مدل بدست آمده از راکتور جریان شعاعی غیر آدیباتیک در طراحی جدید ، برای بخار سوپر هیت یکسان مصرفی در مقایسه با دو راکتور آدیباتیک جریان شعاعی با گرمایش بین مراحل ، انتخاب پذیری بیشتری دارد.

بیشتر روابط سینتیکی در دسترس برای مدلسازی راکتورهای صنعتی شبه هموزن استفاده می شوند. در این پروژه مدل هموزن با در نظر گرفتن نفوذ واکنشگرها به داخل قرص های کاتالیست و بدست آوردن پروفایل غلظت داخل دانه به مدل هتروژن توسعه داده می شود.

سپس هیدروژن گیری غیر آدیباتیک انتخاب گردیده و برنامه ریاضی آن نوشته شده و گرافهای آن در سه دمای ۸۰۰ ، ۸۱۰ و ۸۲۰ درجه کلوین ترسیم و نتایج در پایان آورده شده است ، این واکنش بر روی بستر کاتالیستی که بخش عمده آن را اکسید آهن تشکیل می دهد ، صورت می پذیرد. واکنشهای انجام شده بر روی بستر شش واکنش فرض شده است و بر اساس آن معادلات حاکم بدست آورده شده است.

از نتایج حاصل از حل معادلات می توان نتیجه گرفت که هر چه شعاع قرص های کاتالیست را کاهش دهیم و دمای ورودی واکنشگرها را افزایش دهیم به خاطر افزایش عامل تأثیر ، مدل هموزن به مدل هتروژن نزدیکتر می شود و می توان از حل معادلات بخش هتروژن صرف نظر کرد.