دانشگاه آزاد اسلامی

واحد تهران جنوب

دانشکده تحصیلات تکمیلی

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

مهندسی شیمی – فرآیند

عنوان :

شبیه سازی راکتور پیرولیز پروپان به روش CFD

استاد راهنما :

استاد مشاور :

نگارش:

فهرست مطالب

عنوان مطالب	شماره صفحه
چکیده	**۱**
مقدمه	۲
فصل اول: صنعت پتروشیمی	
۱-۱- صنعت پتروشیمی	**۶**
۱-۱-۱-صنعت پتروشیمی در ایران	**۷**
۱-۲- مجتمع های پتروشیمی	**۸**
۱-۳- مواد اولیه صنعت پتروشیمی	**۱۷**
۱-۳-۱- تولید اولفین ها	**۲۳**
۱-۴ بررسی فرآیند پیرولیز	**۲۷**
۱-۴-۱- کوره و راکتور شکست حرارتی	**۲۷**
۱-۴-۲- بخش بازیابی انرژی	**۳ ۳**
۱-۴-۳- تخلیص جریان محصولات خروجی	**۳۵**
۱-۴-۴- تراکم ، گوگرد زدایی و خشک کردن	**۳۵**
۱-۵- پارامترهای مهم عملیاتی	**۳۸**
۱-۵-۱ بخار رقیق کننده	**۳۸**

فهرست مطالب

عنوان مطالب	شماره صفحه
۱-۵-۲- فشار	۴۰
۱-۵-۳- سرعت جرمی	۴۱
۱-۶- عوامل موثر بر دیواره راکتور	۴۱
۱-۷- تشکیل کک	۴۴
۱-۸- مکانیزم تشکیل کک	۴۹
۱-۹- راکتورهای لوله ای با قطر متغیر (Swaged Reactors)	۵۴
فصل دوم : مدلسازی راکتور پیرولیز پروپان	
۲-۱- مدل سینتیکی	۵۸
۲-۱-۱- تعیین پارامترهای سینتیکی	۶۲
۲-۱-۲- سینتیک تشکیل کک	۶۶
۲-۲- مدل سازی ریاضی	۷۱
۲-۲-۱ پیوستگی جرم	۷۱
۲-۲-۲- پیوستگی انرژی	۷۳
۲-۲-۳ پیوستگی مومنتوم	۷۸

فهرست مطالب

عنوان مطالب	شماره صفحه

فصل سوم : شبیه سازی به کمک روش CFD

۳-۱- متدهای پیشگویی ۸۲

۳-۱-۱- امتیازات یک محاسبه تئوری ۸۳

۳-۲- CFD چیست ؟ ۸۵

۳-۳- چگونگی عملکرد یک برنامه CFD ۸۶

۳-۴- توانایی های نرم افزار FLUENT ۹۰

۳-۵-آشنایی کلی با نرم افزار و قابلیت های آن ۹۱

۳-۵-۱-مقدمه ۹۱

۳-۵-۲- قابلیتهای برنامه ۹۲

۳-۵-۳- دید کلی از نرم افزار FLUENT ۹۳

۳-۶- توپولوژی شبکه ۹۴

۳-۶-۱- مثالهایی از توپولوژی شبکه های قابل قبول ۹۵

۳-۶-۲- انتخاب نوع شبکه مناسب ۹۶

۳-۷- چشم اندازی از مدل های فیزیکی بکار رفته در FLUENT ۹۷

۳-۷-۱- معادلات مومنتوم و پیوستگی ۹۸

۳-۷-۲- معادلات بقای مومنتوم ۹۸

۳-۷-۳-انتقال حرارت ۹۹

فهرست مطالب

عنوان مطالب	شماره صفحه

فصل چهارم : شبیه سازی راکتور پیرولیز توسط نرم افزار

مقدمه ۱۰۲

۴-۱- هندسه راکتور ۱۰۲

۴-۲- شبکه بندی (مش بندی) راکتور ۱۰۳

۴-۳- مشخصات راکتور پیرولیز پروپان ۱۰۴

۴-۴- روشهای حل عددی توسط FLUENT ۱۰۷

فصل پنجم : بحث و نتیجه گیری

نتایج و بحث ۱۱۱

نتیجه گیری ۱۲۶

پیشنهادات ۱۲۶

پیوست

متن برنامه UDF به زبان C جهت شبیه سازی در نرم افزار ۱۲۸

منابع و ماخذ

منابع فارسی ۱۳۲

منابع لاتین ۱۳۳

چکیده انگلیسی ۱۳۹

فهرست جدولها

عنوان	شماره صفحه

- جدول(۱-۱)درصد وزنی محصولات خروجی از راکتور ۲۵
- جدول(۱-۲)نسبتهای متداول از بخار آب به خوراک هیدروکربنی ۳۹
- جدول(۱-۳)واکنشهای اکسیداسیون سطح ۴۲
- جدول(۱-۴)ترتیب محصولات اصلی در پیرولیز پروپان ۵۴
- جدول(۲-۱)مدل مولکولی واکنشهای کراکینگ حرارتی پروپان ۶۲
- جدول(۲-۲)مکانیزمهای واکنش تشکیل کک ۶۸
- جدول(۲-۳)پارامترهای سینتیکی تشکیل کک ۶۹
- جدول(۲-۴)ضرایب ظرفیت حرارتی گازها ۷۵
- جدول(۲-۵)گرمای تشکیل اجزا مخلوط ۷۶
- جدول(۲-۶)گرمای واکنشها در ۲۵ درجه سانتیگراد ۷۷
- جدول(۲-۷)ضرایب ویسکوزیته گازها ۸۰
- جدول(۴-۱)ضرایب مورد استفاده در مدل k-ϵ استاندارد ۱۰۴
- جدول(۴-۲)شرایط مرزی مدل ۱۰۶
- جدول(۴-۳)مقادیر فاکتور زیر تخفیف ۱۰۷

فهرست نمودارها

عنوان	شماره صفحه

- نمودار(۲-۱)سرعت تشکیل کک و مقدار آن بر حسب زمان ۶۵
- نمودار(۲-۲)سرعت یکنواخت تشکیل کک بر حسب میزان تبدیل ۶۶
- نمودار(۲-۳)تغییرات سرعت تشکیل کک به میزان تبدیل ۷۱
- نمودار(۲-۴)تغییرات فلاکس حرارتی با طول راکتور ۷۳
- نمودار(۴-۱)تاریخچه همگرایی ۱۰۹
- نمودار(۵-۱)تغییرات درجه حرارت مخلوط واکنش ۱۱۳
- نمودار(۵-۲)تغییرات فشار در طول راکتور ۱۱۴
- نمودار(۵-۳)تغییرات میزان تبدیل در طول راکتور ۱۱۵
- نمودار(۵-۴)بازدهی پروپیلن ۱۱۶
- نمودار(۵-۵)تغییرات غلظت کک در طول راکتور ۱۱۷
- نمودار(a-۵-۶)توزیع محصولات در طول راکتور ۱۱۸
- نمودار(b-۵-۶) توزیع محصولات در طول راکتور ۱۱۹

فهرست شکلها

عنوان	شماره صفحه
• شکل(۱-۱)شمای یک کوره پیرولیز	۲۸
• شکل(۱-۲)طرحهای مختلف لوله های پیرولیز	۳۱
• شکل(۱-۳)نمونه ای از طرح کوره ها	۳۲
• شکل(۱-۴)بازیابی انرژی (TLX)	۳۴
• شکل(۱-۵)طرحی از یک کوره کراکینگ	۳۴
• شکل(۱-۶)فرایند جداسازی محصولات	۳۷
• شکل(۱-۷)نمونه عکسبرداری شده به روش SEM از کک	۵۳
• شکل(۲-۱)شمایی از دستگاه مورد استفاده Froment	۶۳
• شکل(۲-۲)شمایی از راکتور مورد استفاده Froment	۶۳
• شکل(۳-۱)انواع سلولهای قابل قبول توسط نرم افزار	۹۵
• شکل(۴-۱)مشخصات راکتور پیرولیز	۱۰۳
• شکل(۴-۲)معادلات سرعت واکنش	۱۰۵
• شکل(۵-۱)پروفایل کانتورهای دمایی مخلوط واکنش	۱۱۴
• شکل(۵-۲)پروفایل کانتورهای فشاری در طول راکتور	۱۱۵
• شکل(۵-۳)پروفایل کانتورهای میزان تبدیل پروپان	۱۱۶
• شکل(۵-۴)پروفایل کانتورهای بازدهی پروپیلن	۱۱۷

فهرست شکلها

عنوان	شماره صفحه
• شکل(۵-۵)پروفایل کانتورهای غلظت کک	۱۱۸
• شکل(۵-۶)پروفایل کانتورهای تولید هیدروژن	۱۱۹
• شکل(۵-۷)پروفایل کانتورهای تولید اتیلن	۱۲۰
• شکل(۵-۸)پروفایل کانتورهای تولید متان	۱۲۰
• شکل(۵-۹)پروفایل کانتورهای تولید بوتیلن	۱۲۱
• شکل(۵-۱۰)پروفایل کانتورهای تولید استیلن	۱۲۱
• شکل(۵-۱۱)پروفایل کانتورهای توزیع دما در جهت شعاعی	۱۲۲
• شکل(۵-۱۲)پروفایل واکنش $(C_3H_8 \longrightarrow C_2H_4+CH_4)$	۱۲۲
• شکل(۵-۱۳)پروفایل واکنش$(C_3H_8 \longrightarrow C_3H_6+H_2)$	۱۲۳
• شکل(۵-۱۴)پروفایل واکنش$(C_3H_8+C_2H_4 \longrightarrow C_2H_6+C_3H_6)$	۱۲۳
• شکل(۵-۱۵)پروفایل کانتورهای واکنش$(C_3H_6 \longrightarrow C_2H_4)$	۱۲۴
• شکل(۵-۱۶)پروفایل واکنش$(C_2H_4+C_2H_4 \longrightarrow C_4H_6)$	۱۲۴
• شکل(۵-۱۷)پروفایل کانتورهای واکنش $(C_3H_6 \longrightarrow C)$	۱۲۵

چکیده

تبدیل هیدروکربنهای اشباع پارافینی به هیدروکربنهای غیر اشباع آلیفاتیکی و آروماتیکی از جمله مهمترین فرآیندهای پتروشیمی محسوب میشود.در این پروژه فرآیند شکست حرارتی(پیرولیز) پروپان در یک راکتور صنعتی به روش دینامیک سیالات محاسباتی (**CFD**) شبیه سازی شده است.مدل مورد استفاده در این پروژه شامل یک راکتور لوله ای به طول ۹۵ متر میباشد.مدل سینتیکی استفاده شده ،مدل مولکولی شامل ده واکنش شکست به همراه واکنش تشکیل کک میباشد.فلاکس حرارتی با یک پروفایل ثابت به دیواره های راکتور وارد میگردد.افزایش دمای دیواره ها سبب داغ شدن مخلوط گازی شده و واکنشهای پیرولیزرا سبب میشود.نتایج حاصل از شبیه سازی سه بعدی مدل نشان داد که تعدادی از ترکیبات حاصل از پیرولیز دارای غلظت ماکزیمم در طول راکتور هستند که نشان دهنده شرکت نمودن این ترکیبات در واکنشهای ثانویه میباشد. پیش بینی محل وقوع واکنشها در هر نقطه از راکتور از جمله مزایای استفاده از این روش میباشد.در این شبیه سازی مقادیر پروفایل دما،فشار،غلظت ترکیبات حاصل از پیرولیز و کک تشکیل شده در طول راکتور قابل مقایسه با نتایج تجربی است.پروفایل دمایی در جهت شعاعی در مقاطع مختلف از طول راکتور نیز بررسی گردیده است.

کلمات کلیدی:CFD،پیرولیز ، پروپان ، مدل سینتیکی مولکولی