



دانشگاه آزاد اسلامی

واحد تهران جنوب

دانشکده تحصیلات تکمیلی

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

مهندسی شیمی - فرایند

عنوان :

تبدیل مستقیم متان به اتیلن با استفاده از دو رآکتور کاتالیستی

استاد راهنما :

استاد مشاور :

نگارش :

۱	چکیده
۲	مقدمه
۴	۱- کلیات
۴	۱-۱- فرایند تبد یل مستقیم اتان به اتیلن
۵	۱-۲- راکتور با بستر ثابت
۵	۱-۲-۱- کاتالیست La / MgO
۶	۱-۲-۱-۱- آماده سازی کاتالیست
۷	۱-۲-۱-۲- تاثیر دما
۸	۱-۲-۱-۳- تاثیر غلظت اکسیژن
۱۲	۱-۲-۲- کاتالیست Li / MgO
۱۳	۱-۲-۲-۱- آماده سازی کاتالیست
۱۳	۱-۲-۲-۳- تاثیر دمای واکنش
۱۵	۱-۲-۲-۳-۱- تاثیر متغیر $\frac{F}{W}$
۱۷	۱-۲-۲-۴- تاثیر غلظت اکسیژن ورودی
۱۸	۱-۲-۲-۵- مطالعه متغیرهای فرایند با استفاده از روش CCD
۲۶	۱-۲-۳- کاتالیست Mn / Na ₂ WO ₄ / SiO ₂

فهرست مطالب

شماره صفحه	عنوان مطالب
۲۶	۱-۳-۲-۱- آزمایشات
۲۸	۱-۳-۲-۲- عملیات با یک بار گذار از راکتور و با کاتالیست $Mn/Na_2WO_4/SiO_2$
۳۲	۳-۳-۲-۱- عملیات جریان برگشتی با کاتالیست $Mn/Na_2WO_4/SiO_2$
۳۵	۱-۴-۲-۱- کاتالیست $Na/BaTiO_3$
۳۶	۱-۴-۲-۱- ساختار یک راکتور آزمایشگاهی کوچک و عملیات آن
۳۷	۱-۴-۲-۲- مدلسازی راکتور
۴۰	۱-۴-۲-۳- برآورد اقتصادی مدل
۴۱	۱-۵-۲-۱- کاتالیست La_2O_3/CaO
۴۳	۱-۵-۲-۱- نتایج شبیه سازی در حالت ایزوترمال
۴۸	۱-۵-۲-۲- راکتور آدیاباتیک با بستر ثابت
۵۲	۱-۳-۲-۱- راکتور با بستر سیال
۵۲	۱-۳-۱- یک مدل گسترده با استفاده از کاتالیست La_2O_3/CaO
۵۳	۱-۳-۱-۱- مدل بستر سیال
۵۴	۱-۳-۱-۲- مدل صفحه توزیع کننده

فهرست مطالب

شماره صفحه	عنوان مطالب
۵۵	۳-۱-۳-۱- شبکه کینتیک واکنش
۵۷	۳-۱-۴-۱- آنالیز هیدرو دینامیک بستر
۵۸	۳-۱-۵-۱- داده های تجربی
۵۸	۳-۱-۶-۱- مشخصات مدل
۶۲	۳-۱-۷-۱- تاثیر هیدرو دینامیک بستر بر روی مسیر واکنش پروفایل غلظت
۶۳	۳-۱-۸-۱- نتایج شبیه سازی
۶۶	۳-۱-۹-۱- تاثیر دما و نسبت متان به اکسیژن بر روی توزیع محصولات
۷۰	۳-۱-۱۰-۱- تاثیر دما و سرعت گاز
۷۲	۳-۲-۱- راکتور با بستر سیال آکنه دار و کاتالیست $CaO/NaOH$
۷۲	۳-۲-۱- مشخصات سیستم
۷۳	۳-۲-۲-۱- شرایط تجربی
۷۳	۳-۲-۳-۱- عملیات راکتور
۷۴	۳-۲-۴-۱- تاثیر متغیرهای فرایند بر روی گزینش پذیری
۷۷	۳-۳-۱- کاتالیست Li/MgO

فهرست مطالب

شماره صفحه

عنوان مطالب

۷۸	۱-۳-۳-۱- مشخصات سیستم
۸۰	۱-۳-۳-۲- تاثیر اکسیژن خوراک بر روی عملکرد راکتور
۸۰	۱-۳-۳-۳- بازده محصولات و مصرف ویژه واکنش دهنده
۸۲	۱-۳-۳-۴- افزایش دمای آدیباتیک
۸۴	فصل دوم
۸۵	۲- مدلسازی فرایند و برنامه کامپیوتری
۸۵	۲-۱- مدل راکتور با بستر ثابت
۸۵	۲-۱-۱- مشخصات راکتور
۸۷	۲-۱-۲- نتایج
۹۱	۲-۱-۳- نتایج تجربی
۹۱	۲-۱-۴- دقت مدل
۹۱	۲-۲- مدل راکتور با بستر سیال
۹۳	۲-۲-۱- کینتیک واکنش
۹۵	۲-۲-۲- نتایج و نمودارها
۹۸	۲-۳-۲- نتایج تجربی
۹۸	۲-۴-۲- دقت مدل
۱۰۳	فصل سوم
۱۰۴	۳- نتایج و پیشنهادات
۱۰۶	علائم اختصاری
۱۰۸	منابع و ماخذ
۱۰۸	فهرست منابع فارسی

فهرست مطالب

شماره صفحه

عنوان مطالب

۱۰۸

فهرست منابع لاتین

۱۰۹

سایت های اطلاع رسانی

۱۱۰

چکیده انگلیسی

فهرست جدول ها

شماره صفحه

عنوان

۱۹	۱ : محدوده عملیاتی متغیر های مستقل
۲۰	۲ : نتایج تجربی آزمایش
۲۳	۳ : آنالیز واریانس برای تبدیل متان، بازده اتیلن و گزینش پذیری اتیلن
۳۱	۴ : مقادیر کارکرد کاتالیست برای شکل های ۱۷ و ۱۸
۳۵	۵ : کارکرد کاتالیست برای شکل های ۱۹ و ۲۰
۳۸	۶ : مقایسه بین نتایج حاصل از مدل ملزکو/استانش و نتایج نمونه آزمایشگاهی
۴۸	۷ : تاثیر آب موجود در خوراک
۵۷	۸ : واکنش های ابتدایی در شبکه واکنش های دو فازی
۵۸	۹ : محدوده عملیاتی واکنش در شرایط آزمایشگاهی
۷۳	۱۰ : شرایط تجربی واکنش در راکتور
۸۳	۱۱ : تاثیر اتان موجود در خوراک بر عملکرد راکتور
۸۵	۱۲ : مشخصات راکتور با بستر ثابت
۸۶	۱۳ : پارامتر های کینتیکی
۹۱	۱۴ : نتایج تجربی راکتور با بستر ثابت
۹۲	۱۵ : مشخصات راکتور با بستر سیال
۹۴	۱۶ : پارامتر های کینتیکی واکنش
۹۸	۱۷ : نتایج تجربی راکتور با بستر سیال

فهرست نمودارها

	عنوان	شماره صفحه
۸۸	۱: تغییرات تبدیل متان، گزینش پذیری C2 و بازده اتیلن در راکتور با بستر ثابت- ۹۷۵ کلوین	
۸۹	۲: تغییرات تبدیل متان، گزینش پذیری C2 و بازده اتیلن در راکتور با بستر ثابت- ۱۰۲۵ کلوین	
۸۹	۳: تغییرات تبدیل متان بر حسب دما در راکتور با بستر ثابت	
۹۰	۴: تغییرات گزینش پذیری C2 بر حسب دما در راکتور با بستر ثابت	
۹۰	۵: تغییرات بازده اتیلن بر حسب دما در راکتور با بستر ثابت	
۹۵	۶: تغییرات تبدیل متان، گزینش پذیری C2 و بازده اتیلن در راکتور با بستر سیال- ۹۷۵ کلوین	
۹۶	۷: تغییرات تبدیل متان، گزینش پذیری C2 و بازده اتیلن در راکتور با بستر سیال- ۱۰۲۵ کلوین	
۹۶	۸: تغییرات تبدیل متان بر حسب دما در راکتور با بستر سیال	
۹۷	۹: تغییرات گزینش پذیری C2 بر حسب دما در راکتور با بستر سیال	
۹۷	۱۰: تغییرات بازده اتیلن بر حسب دما در راکتور با بستر سیال	
۹۸	۱۱: تغییرات تبدیل متان، گزینش پذیری C2 و بازده اتیلن در راکتور با بستر ثابت با نسبت مولی متان به اکسیژن	
۹۹	۱۲: تغییرات تبدیل متان، گزینش پذیری C2 و بازده اتیلن در راکتور با بستر سیال با نسبت مولی متان به اکسیژن	
۱۰۰	۱۳: عملکرد راکتور سیال هنگامی که قبل از راکتور ثابت قرار می گیرد- ۹۷۵ کلوین	
۱۰۰	۱۴: عملکرد راکتور ثابت هنگامی که قبل از راکتور سیال قرار می گیرد- ۹۷۵ کلوین	
۱۰۱	۱۵: عملکرد راکتور سیال زمانی که قبل از راکتور ثابت قرار می گیرد- ۱۰۲۵ کلوین	
۱۰۱	۱۶: عملکرد راکتور ثابت زمانی که قبل از راکتور سیال قرار می گیرد- ۱۰۲۵ کلوین	
۱۰۲	۱۷: تبدیل متان، گزینش پذیری و بازده اتیلن در راکتور سیال با نسبت مولی متان به اکسیژن	
۱۰۲	۱۸: تبدیل متان، گزینش پذیری و بازده اتیلن در راکتور ثابت با نسبت مولی متان به اکسیژن	

فهرست شکل‌ها

شماره صفحه	عنوان
۶	۱: سیستم دو بستر کاتالیستی
۶	۲: نحوه نصب راکتور با دو بستر کاتالیستی
۸	۳: تاثیر پارامترهای واکنش بر روی فعالیت کاتالیست و توزیع محصولات
۱۴	۴: تاثیر دمای عملیاتی بر روی تبدیل متان و گزینش پذیری هیدرو کربن‌ها
۱۶	۵: تاثیر $\frac{F}{W}$ بر روی تبدیل متان و بازده محصول و گزینش پذیری هیدرو کربن‌ها و نسبت اتیلن به اتان
۱۸	۶: تاثیر غلظت اکسیژن ورودی بر روی تبدیل متان و بازده محصول و گزینش پذیری هیدرو کربن‌ها و نسبت اتیلن به اتان
۲۰	۷: مقایسه تبدیل متان مشاهده شده با نتایج حاصل از پیش بینی
۲۱	۸: مقادیر p -value برای تبدیل متان
۲۱	۹: مقایسه بازده اتیلن مشاهده شده با نتایج حاصل از پیش بینی
۲۲	۱۰: مقادیر p -value برای بازده اتیلن
۲۳	۱۱: بازده اتیلن به عنوان تابعی از دمای عملیات و غلظت اکسیژن
۲۴	۱۲: بازده اتیلن به عنوان تابعی از دما و مقدار $\frac{F}{W}$
۲۴	۱۳: بازده اتیلن به عنوان تابعی از غلظت اکسیژن ورودی و مقدار $\frac{F}{W}$
۲۵	۱۴: مقایسه مقادیر پیش بینی شده و تجربی برای گزینش پذیری اتیلن
۲۵	۱۵: مقایسه مقادیر p -value برای گزینش پذیری اتیلن
۲۷	۱۶: نمایه سیستم $GRRS$
۲۹	۱۷: تاثیر دبی کل گاز بر تبدیل متان، هیدرو کربن C_2 و گزینش پذیری اتیلن
۳۰	۱۸: تاثیر دبی کل بر پارامترهای خروجی فرایند
۳۳	۱۹: تاثیر دبی اکسیژن ورودی بر تبدیل متان و گزینش پذیری محصول
۳۴	۲۰: تاثیر تبدیل متان بر روی گزینش پذیری اتان و اتیلن - تاثیر تبدیل متان بر روی بازده اتان، اتیلن و هیدرو کربن‌ها

فهرست شکل‌ها

شماره صفحه	عنوان
۳۷	۲۱: شبکه واکنشی غیر همگن
۳۸	۲۲: شبکه واکنشی همگن
۳۹	۲۳: پیش بینی دما در داخل رآکتور
۳۹	۲۴: پیش بینی پروفایل ترکیب محصولات داخل رآکتور
۴۰	۲۵: پروفایل دما در داخل رآکتور در شرایطی که توزیع اکسیژن بهینه است
۴۴	۲۶: تاثیر نسبت متان به اکسیژن و دما بر روی تبدیل متان، گزینش پذیری C_2 و بازده C_2
۴۶	۲۷: تاثیر زمان تماس بر روی تبدیل متان، گزینش پذیری و بازده C_2 در دما های ۹۷۳ و ۱۱۰۳ کلوین
۴۶	۲۸: تاثیر گاز نیتروژن موجود در خوراک بر روی تبدیل متان و بازده محصول
۴۹	۲۹: پرو فایل دما، گزینش پذیری C_2 و بازده C_2 در نسبت های مختلف متان به اکسیژن
۵۱	۳۰: پروفایل دما در طول بستر کاتالیستی در دما های مختلف
۵۱	۳۱: تاثیر نیتروژن بر بازده اتیلن و اتان
۵۵	۳۲: بستر سیال مدل کاتو و ون
۵۶	۳۳: شبکه واکنشی غیر همگن و معادلات استوکیومتری
۵۶	۳۴: شبکه واکنش برای واکنش های غیر همگن
۵۹	۳۵: مجموع مربعات خطای نرمال برای تبدیل متان و گزینش پذیری C_2 برای مدل های مختلف
۶۱	۳۶: مقایسه نتایج تجربی و نتایج شبیه سازی
۶۲	۳۷: مجموع مربعات خطا برای تبدیل اکسیژن و متان، گزینش پذیری C_2
۶۴	۳۸: پروفایل غلظت گاز در شرایط مختلف
۶۸	۳۹: وابستگی تبدیل متان، گزینش پذیری و بازده C_2 نسبت اتیلن به اتان، نسبت مونوکسید کربن به اکسیدهای کربن و گزینش پذیری هیدروژن به دمای واکنش و نسبت متان به اکسیژن
۷۱	۴۰: وابستگی تبدیل اکسیژن، تبدیل متان، گزینش پذیری و بازده C_2 به دما و سرعت گاز
۷۴	۴۱: پروفایل دما در دوراکتور با بستر فلودایز
۷۵	۴۲: تاثیر دما بر روی گزینش پذیری

فهرست شکل‌ها

شماره صفحه

عنوان

۷۶	۴۳: تاثیر فشار جزئی اکسیژن و متان بر روی گزینش پذیری
۷۶	۴۴: تاثیر تبدیل اکسیژن بر روی گزینش پذیری
۷۸	۴۵: طراحی مفهومی فرایند <i>OCM</i>
۷۹	۴۶: نمودار جریان‌ی واکنش <i>OCM</i> در بستر سیال
۸۱	۴۷: تاثیر اکسیژن خوراک بر روی تبدیل متان، مصرف اکسیژن و گزینش پذیری محصول
۸۱	۴۸: رابطه بین گزینش پذیری هیدروکربن و تبدیل متان
۸۲	۴۹: بازده محصولات به عنوان تابعی از میزان اکسیژن
۸۳	۵۰: افزایش دمای آدیاباتیک به عنوان تابعی از تبدیل متان

چکیده:

یک مدل برای تبدیل مستقیم متان به اتیلن در دو راکتور کاتالیستی تهیه شده است. این مدل فقط برای حالت ایزوترمال واکنش می باشد. پارامترهای مورد مطالعه در این مدل، غلظت اکسیژن ورودی، دما، سرعت فضایی و تاثیرات نیتروژن و آب موجود در خوراک می باشد. کاتالیست مورد استفاده در هر دو راکتور La_2O_3/CaO می باشد. میزان تبدیل متان در راکتور ثابت بستگی شدیدی به نسبت متان به اکسیژن و دما دارد در حالیکه در بستر سیال هیدرودینامیک بستر نیز در میزان تبدیل متان، گزینش پذیری و بازده اتیلن موثر است. بهترین دمای عملیاتی برای راکتور با بستر ثابت ۱۰۹۸ کلوین است که در آن بازده اتیلن حداکثر است. در راکتور با بستر سیال این دما ۱۰۹۳ کلوین است که در آن بیشترین مقدار بازدهی اتیلن حاصل شده است.