

مدل سازی و شبیه سازی راکتورهای پیشنهادی چندمنظوره برای بهبود تولید آروماتیک ها در فرایند تبدیل کاتالیستی نفتا

مهدی شاکری، داود ایرانشاهی*

دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی تکنیک تهران)، تهران، ایران

مشخصات مقاله

تاریخچه مقاله:

دریافت: ۱۰ شهریور ۱۳۹۸
دریافت پس از اصلاح: ۵ بهمن ۱۳۹۸
پذیرش نهایی: ۲۲ اسفند ۱۳۹۷

کلمات کلیدی:

فرایند تبدیل کاتالیستی نفتا
راکتور چندمنظوره
غشای پالادیومی
فرایند هیدرودی آلکیلاسیون متزایلین
تولید آروماتیک

چکیده

در این پژوهش بهبود فرایند تبدیل کاتالیستی نفتا به عنوان یکی از فرایندهای مهم در پالایشگاه ها و پتروشیمی ها مورد توجه قرار گرفته است. تمرکز اصلی بر روی تعویض راکتورهای معمولی بستر پر شده فرایند با راکتورهای جدید چندمنظوره است. این راکتورهای پیشنهادی شامل فرایندهای تبدیل کاتالیستی نفتا و هیدرودی آلکیلاسیون متزایلین است که توسط دیواره جامد از هم جدا شده اند؛ همچنین قسمت نفوذ که توسط دیواره غشای پالادیومی از قسمت تبدیل کاتالیستی جدا شده است. فرایند گرماگیر کاتالیستی از یک طرف با فرایند هیدرودی آلکیلاسیون متزایلین تبادل گرما می کند، در حالی که از طرف دیگر با قسمت نفوذ تبادل هیدروژن را انجام می دهد. با توجه به نتایج شبیه سازی، دبی مولی آروماتیک در این سیستم نسبت به راکتورهای معمولی حدود ۱۱٪ افزایش می یابد. در نهایت تاثیرات پارامترهای طراحی مانند دمای خوراک فرایند هیدرودی آلکیلاسیون و فشار ورودی گاز جاروکننده بر روی عملکرد سیستم مورد مطالعه قرار گرفته است.

* عهده دار مکاتبات

iranshahi@aut.ac.ir

حقوق ناشر محفوظ است.

۱- مقدمه

در میان واحدهای پالایشگاهی، واحد تبدیل کاتالیستی نفتا قدمت زیادی داشته و نقش مهمی را در پالایشگاهها ایفا می‌کند [۱]. خوراک این واحد نفتا می‌باشد که از میانه‌های برج‌های تقطیر اتمسفریک تهیه می‌شود. نفتا مجموعه‌ای وسیع از هیدروکربن‌های با عدد اکتان پایین و محدود نقطه جوش بین $200-300^{\circ}\text{C}$ است. نفتا از پارافین‌های سبک مثل آلکان‌ها تا هیدروکربن‌های سنگین مثل واکس را شامل می‌شود. در این فرایند کاتالیستی، نفتا توسط مجموعه‌ای از واکنش‌ها به محصولاتی با عدد اکتان بالا (ریفورمیت) تبدیل می‌شوند [۲].

بررسی راکتورهای هر واحد پالایشگاهی یا پتروشیمیایی به علت اهمیت آن در فرایند همواره از اولویت‌های محققان بوده است. در واقع راکتورهای شیمیایی، قلب یک فرایند هستند. از این رو کارهای زیادی به منظور پیش‌بینی رفتار راکتورهای واحد تبدیل کاتالیستی صورت گرفته است. Bommanna و همکاران در سال ۱۹۸۹ راکتورهای بستر ثابت فرایند را با توجه به مدل سینتیکی ارائه شده توسط اسمیت مدل سازی کردند [۳]. آن‌ها مطابقت مدل پیشنهادی که مدل هموزن بود را با دو سری از داده‌های تجربی مقایسه کردند. مطابقت خوبی بین نتایج پیش‌بینی شده با داده‌های صنعتی وجود داشت. Chaudhuri و Padmavathi در سال ۱۹۹۷ سه ریفورمر سری فرایند را با در نظر گرفتن غیرفعال شدن کاتالیست مدل کردند [۴]. آن‌ها در این کار از مدل یک‌بعدی و هموزن استفاده کردند و پروفایل‌های غلظت و دمایی را برای اجزای مختلف در هر ریفورمر رسم کردند. همچنین Elizalde و Ancheyta در سال ۲۰۱۵ رفتار یک راکتور بستر ثابت فرایند را با استفاده از مدل شبه‌هموزن، یک‌بعدی و ناپایا پیش‌بینی کردند [۵]. شبیه‌سازی این راکتور در دو حالت گذرا انجام شد: یکی در حالت راه‌اندازی سیستم و دیگری در حالت اختلال در دمای ورودی راکتور.

در سال‌های اخیر تمرکز محققان بر روی بهبود فرایند کاتالیستی تبدیل نفتا بوده است. بیشتر تحقیقات انجام شده برای این منظور هم بر روی بهبود و اصلاح راکتورهای فرایند صورت گرفته است [۶]. تمامی کارهای صورت گرفته بر مبنای افزایش تولید آروماتیک‌ها به عنوان اجزای اصلی محصول ریفورمیت و هیدروژن به عنوان مهمترین محصول جانبی فرایند و همچنین کاهش هزینه‌های عملیاتی و آلاینده‌های زیست محیطی بوده است. خسروانی‌پور و رحیم‌پور در سال

۲۰۰۹ به صورت مفهومی اثر جایگزینی راکتورهای معمولی فرایند تبدیل کاتالیستی با راکتورهای جدید غشایی را بر روی میزان تولید آروماتیک بررسی کردند [۷]. بخشی از هیدروژن از فرایند توسط غشای پالادیومی خارج شده و بنابراین واکنش‌های تعادلی به سمت تولید بیشتر آروماتیک و هیدروژن پیشروی می‌کنند. آن‌ها از یک مدل ریاضی هتروژن و یک‌بعدی برای مدل‌سازی این راکتورهای غشایی استفاده کردند. همچنین اثر غیرفعال شدن کاتالیست‌ها هم به مرور زمان و در طول یک دوره ۸۰۰ روزه بر روی فرایند مطالعه شد. ایرانشاهی و همکاران راکتورهای کوپل حرارتی برای بسترهای متحرک فرایند تبدیل کاتالیستی نفتا را پیشنهاد دادند [۸]. در این کار از مدل سینتیکی توسعه یافته‌ای شامل ۳۲ توده و شبکه‌ای شامل ۸۴ واکنش استفاده شده است. سعیدی و ایرانشاهی پیشنهاد دادند که راکتورهای غشایی جایگزین راکتورهای معمولی بستر متحرک این فرایند گرماگیر شود [۹]. نتایج نشان داد که در این پیکربندی جدید میزان تولید آروماتیک‌ها و همچنین هیدروژن افزایش محسوسی خواهد داشت.

در این پژوهش راکتورهای چند منظوره جدیدی برای بهبود عملکرد فرایند کاتالیستی تبدیل نفتا پیشنهاد شده است. در این راکتور فرایند از یک طرف به واسطه دیواره جامد با فرایند گرمای هیدرودی‌آکسیلاسیون متازایلین تبادل گرما و از طرف دیگر به واسطه دیواره غشایی از جنس پالادیوم با قسمت نفوذ (گاز جاروکننده) تبادل هیدروژن می‌کند. این راکتورها موجب افزایش تولید آروماتیک به عنوان محصول اصلی فرایند ریفورمینگ کاتالیستی و نیز هیدروژن به عنوان محصول جانبی این فرایند خواهد شد. از دیگر مزایای این طرح پیشنهادی می‌توان به موارد زیر اشاره کرد:

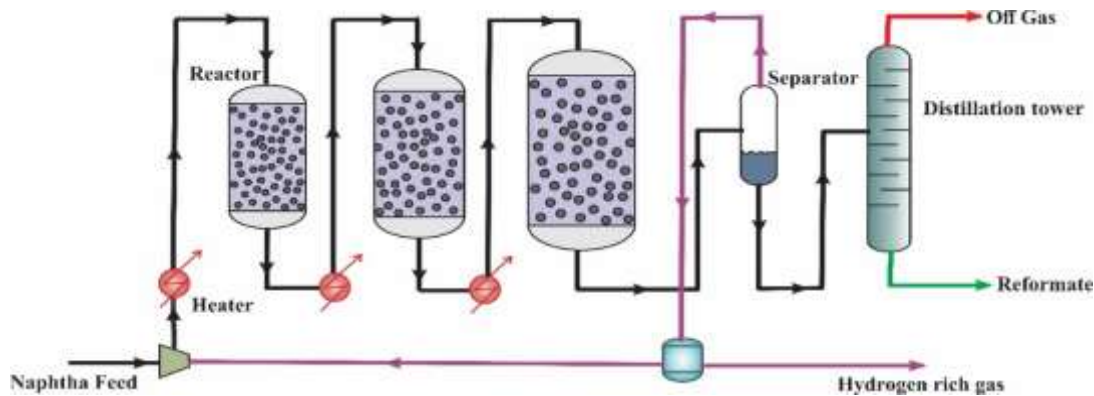
- تولید همزمان چند محصول دلخواه.

- حذف مبدل‌های بین مرحله‌ای در فرایند تبدیل کاتالیستی، در نتیجه کاهش هزینه‌های عملیاتی و کاهش آلاینده‌های زیست‌محیطی ناشی از فرایند احتراق در هیترها مثل CO_2 و NO_x .

- عدم نیاز به تامین هیدروژن مورد نیاز در قسمت‌های مختلف راکتور (گاز جاروکننده و فرایند گرمازا) توسط یک منبع خارجی.

۲- شرح فرایند

۲-۱- فرایند معمولی تبدیل کاتالیستی نفتا



شکل (۱) شماتیک واحد تبدیل کاتالیستی نفتا

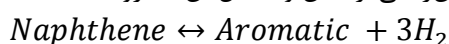
مبدل حرارتی به شرایط عملیاتی برای ورود به راکتور اول می‌رسد. با توجه به این‌که جریان ریفرورمینگ در طول راکتور در حال دریافت انرژی توسط فرایند هیدرودی‌آلکیلاسیون است، بنابراین مبدل‌های بین مرحله‌ای موجود در فرایند معمولی تبدیل کاتالیستی حذف خواهند شد. جریان خروجی قسمت گرماگیر از بستر اول وارد راکتور چند منظوره دوم می‌شود. در واقع خوراک نفتا به صورت سری بین راکتورها جریان دارد. در راکتور دوم هم مثل راکتور قبلی فرایند تبدیل کاتالیستی از یک طرف با قسمت داخلی تبادل گرما و از طرف دیگر با قسمت خارجی تبادل هیدروژن می‌کند. جریان خروجی از راکتور دوم وارد یک راکتور معمولی بستر ثابت خواهد شد. دلیل استفاده از راکتور معمولی به جای راکتور چند منظوره در مرحله آخر این است که اولاً هزینه سیستم افزایش می‌یابد و دوماً اگر در مرحله آخر هم راکتور کوپل‌غشایی قرار داده شود، دمای قسمت گرماگیر به شدت بالا رفته و باعث ایجاد نقاط داغ و بنابراین تخریب و غیرفعال شدن کاتالیست‌های این فرایند خواهد شد.

۳- سینتیک فرایندها

۳-۱- فرایند تبدیل کاتالیستی نفتا

در این پژوهش از مدل ارائه شده توسط Smith استفاده شده است [۱۰]. این مدل اولین و ساده‌ترین مدل ارائه شده بر مبنای روش یکپارچه است. اسمیت خوراک نفتا را به سه توده (شبه‌جزء) مختلف شامل پارافین، نفتن و آروماتیک تقسیم کرده و بر مبنای آن چهار واکنش بین این گروه‌های هیدروکربنی و گاز هیدروژن را تعیین کرده است:

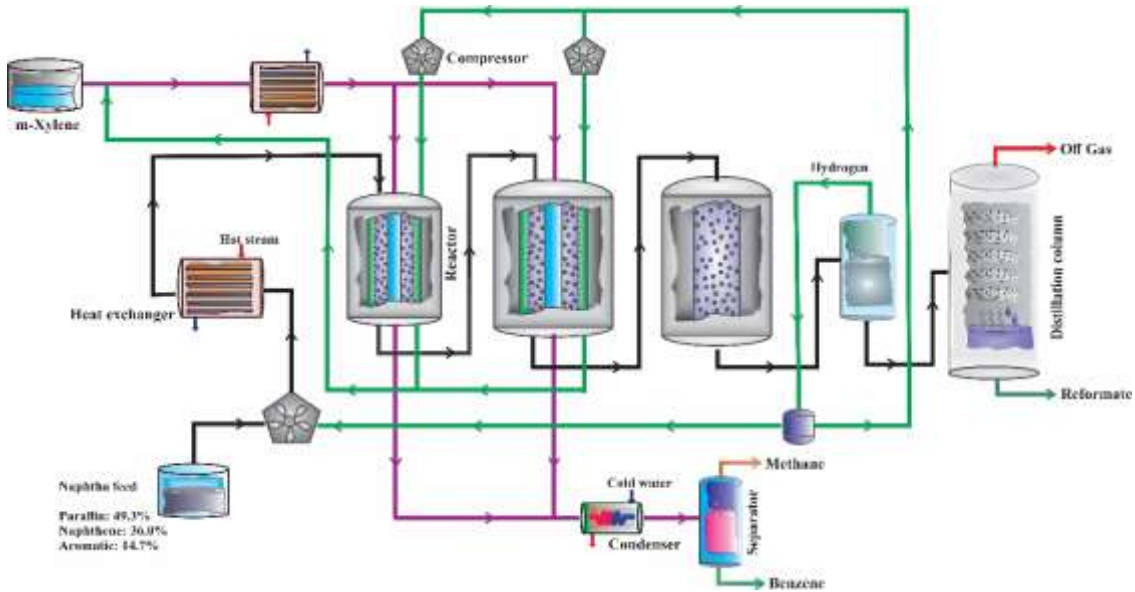
۱- هیدروژن‌زدایی از نفتن و تبدیل آن به آروماتیک:



شکل ۱ شماتیک واحد کاتالیستی تبدیل نفتا را نشان می‌دهد. همانطور که در شکل دیده می‌شود، خوراک نفتا با جریان گازی برگشتی از خود فرایند مخلوط شده و توسط پیش گرم‌کن به دمای عملیاتی مورد نظر می‌رسد. راکتورهای این واحد پالایشگاهی از نوع راکتورهای بستر ثابت و آدیاباتیک هستند. در طول این راکتورها هیدروکربن‌های با کیفیت پایین توسط واکنش‌هایی مثل هیدروژناسیون و هیدروکراکینگ بر روی کاتالیست Pt/Al_2O_3 به هیدروکربن‌های بارزش تبدیل خواهند شد. به دلیل اینکه در کل ماهیت فرایند گرماگیر است، دمای جریان گازی در طول راکتور افت می‌کند. به همین دلیل برای جبران این افت دما از کوره‌هایی بین بسترها استفاده شده تا جریان شرایط ورود به راکتور دوم را پیدا کند. محصول خروجی از آخرین راکتور کاتالیستی وارد جداکننده کم‌فشار شده و گازهای سبک مثل متان و اتان به همراه هیدروژن از بالای جداکننده خارج خواهند شد. بخشی از این گاز غنی از هیدروژن ذخیره‌سازی شده و بخش دیگر آن به سیستم برمی‌گردد. برگشت این گاز به سیستم دو دلیل اصلی دارد: یکی انجام واکنش‌هایی مثل هیدروژناسیون و دیگری جلوگیری از افزایش سرعت غیرفعال شدن کاتالیست‌های فرایند. محصول سنگین مایع به برج تقطیر وارد شده و نهایتاً محصول نهایی (ریفرمیت) که غنی از آروماتیک‌های با کیفیت است، بدست می‌آید.

۳-۲- فرایند کوپل حرارتی نفتاریفرورمینگ همراه با غشا (راکتورهای چندمنظوره)

در این پژوهش پیشنهاد شده است که دو راکتور اول معمولی بستر ثابت فرایند کاتالیستی تبدیل نفتا با راکتورهای جدید چند منظوره جایگزین شوند. در شکل ۲ شماتیکی از فرایند پیشنهادی رسم شده است. خوراک نفتا با بخشی از جریان گاز خروجی غنی از هیدروژن مخلوط شده و با عبور از



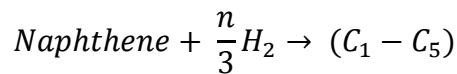
شکل (۲) شماتیکی از سیستم جدید پیشنهادی

۲- حلقوی شدن پارافین و تبدیل آن به نفتن:



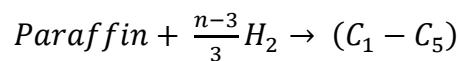
۳- کراکینگ نفتن توسط هیدروژن و تبدیل آن به

گازهای سبک:



۴- کراکینگ پارافین توسط هیدروژن و تبدیل آن به

گازهای سبک:



معادلات سرعت واکنش‌های فوق به همراه گرمای آن‌ها در جدول ۱ آورده شده است. همچنین روابط مربوط به ثابت سرعت واکنش‌ها (k_f) و ثوابت تعادلی (K_e) در جدول ۲ ارائه شده است.

جدول (۱) معادلات سرعت واکنش‌های تبدیل کاتالیستی

نفتا به همراه گرمای واکنش آن‌ها

| Rate equation | Heat of reaction (kJ/kmol) |
|--|----------------------------|
| $r_1 = \frac{k_{f1}}{K_{e1}} (K_{e1} P_N - P_A P_H^3)$ | ۷۱۰۰۰ (۱) |
| $r_2 = \frac{k_{f2}}{K_{e2}} (K_{e2} P_N P_H - P_P)$ | -۳۶۹۰۰ (۲) |
| $r_3 = \left(\frac{k_{f3}}{P_t}\right) P_N$ | -۵۱۹۰۰ (۳) |
| $r_4 = \left(\frac{k_{f4}}{P_t}\right) P_P$ | -۵۶۶۰۰ (۴) |

جدول (۲) روابط ثابت‌های واکنش و تعادلی فرایند تبدیل

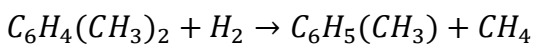
کاتالیستی نفتا

| | |
|--|-----|
| $k_{f1} = 9.87 \times \exp\left(23.21 - \frac{36300}{1.8T}\right)$ | (۵) |
| $k_{f2} = 9.87 \times \exp\left(35.98 - \frac{58500}{1.8T}\right)$ | (۶) |
| $k_{f3} = k_{f4} = \exp\left(42.97 - \frac{63800}{1.8T}\right)$ | (۷) |
| $K_{e1} = 1.04 \times 10^{-3} \exp\left(46.15 - \frac{46045}{1.8T}\right)$ | (۸) |
| $K_{e2} = 9.87 \times \exp\left(-7.12 + \frac{8000}{1.8T}\right)$ | (۹) |

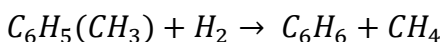
۲-۳- فرایند هیدرودی‌آکیلاسیون

از آن جایی که بنزن به عنوان یکی از خوراک‌های مهم در بخش‌های مختلف پترو شیمی به کار می‌رود، قسمت زیادی از زایلین‌ها و تولوئن توسط فرایندهای هیدرودی‌آکیلاسیون به این ماده ارزشمند تبدیل خواهد شد. فرایند حرارتی و غیرکاتالیستی هیدرودی‌آکیلاسیون متزایلین در دو مرحله متوالی انجام می‌گیرد [۱۱]:

۱- مرحله اول تبدیل متزایلین به تولوئن:



۲- مرحله دوم تبدیل تولوئن به بنزن:



معادلات سرعت برای دو واکنش فوق و گرمای واکنش

آن‌ها در جدول ۳ ارائه شده است [۱۱].

$$J_{H_2} = \frac{Q_0 \exp\left(\frac{-E_p}{RT}\right)}{\delta_{H_2}} \left[\sqrt{P_{H_2,2}} - \sqrt{P_{H_2,3}} \right] \quad (13)$$

که در آن:

$$Q_0 = 6.33 \times 10^{-7} \text{ mol/m.s.Pa}^{0.5}$$

$$E_p = 15700 \text{ kJ/kmol}$$

معادله موازنه انرژی برای قسمت میانی راکتور پیشنهادی

به شکل زیر در می آید:

$$\frac{C_{P,2}}{A_{C,2}} \frac{d(F_{tot,2} T_2)}{dz} = \rho_b \sum r_{i,2} (-\Delta H_{f,i}) + \frac{(\pi D_1)}{A_{C,2}} U_{1-2} (T_1 - T_2) \quad (14)$$

همچنین برای تعیین پروفایل فشار در راکتور ها در

قسمت تبدیل کاتالیستی از معادله ارائه شده توسط Ergun استفاده خواهد شد [۱۳]:

$$-\frac{dP_2}{dz} = 150 \frac{(1 - \varepsilon_2)^2 \mu_2 u_{g,2}}{\varepsilon_2^3 d_{p,2}^2} + 1.75 \frac{(1 - \varepsilon_2) u_{g,2} \rho_2}{\varepsilon_2^3 d_{p,2}} \quad (15)$$

مشخصات خوراک نفتا، کاتالیست و ابعاد راکتورها در

قسمت میانی که دقیقاً مشابه با شرایط راکتورهای معمولی تبدیل کاتالیستی نفتا است، در جدول ۴ گزارش شده است [۱۴].

جدول (۴) مشخصات خوراک نفتا، کاتالیست تازه و ابعاد راکتور

در قسمت تبدیل کاتالیستی نفتا

| پارامتر | مقدار عددی | واحد |
|---------------------------------------|------------|--------------------|
| دبی جرمی خوراک نفتا | ۳۰۴۱۰ | kg/h |
| دبی جرمی محصول ریفرمیت | ۲۴۶۶۰ | kg/h |
| نسبت مولی هیدروژن به هیدروکربن | ۴/۷۵ | - |
| ترکیب درصد مولی هیدروژن در گاز برگشتی | ۶۹/۵۰ | - |
| قطر و طول بستر اول | ۱/۲۵، ۶/۲۹ | m |
| قطر و طول بستر دوم | ۱/۶۷، ۷/۱۳ | m |
| قطر و طول بستر سوم | ۱/۹۸، ۷/۸۹ | m |
| ترکیب درصد مولی اجزا در خوراک نفتا | | |
| پارافین | ۰/۰۶۳۱ | - |
| نفتن | ۰/۰۴۶۱ | - |
| آروماتیک | ۰/۰۱۸۸ | - |
| هیدروژن | ۰/۶۰۶۲ | - |
| گازهای سبک | ۰/۲۶۶۰ | - |
| خواص فیزیکی کاتالیست | | |
| جزء وزنی پلاتین | ۰/۳ | - |
| جزء وزنی رنیوم | ۰/۳ | - |
| قطر ذرات | ۱/۲ | mm |
| سطح ویژه | ۲۲۰ | m ² /gr |
| چگالی بستر | ۳۰۰ | kg/m ³ |
| تخلخل بستر | ۰/۳۶ | - |

جدول (۳) معادلات سرعت واکنش های هیدرودی آلکیلاسیون

متنازایلین به همراه گرمای واکنش آن ها

| Rate equation | Heat of reaction (kJ/kmol) |
|---|----------------------------|
| $R_1 = 16.5 \times 10^{11} \times \exp\left(-\frac{228180}{RT}\right) C_{xylylene} C_H^{0.5}$ | -۵۱۳۰۰ (۱۰) |
| $R_2 = 30.2 \times 10^{11} \times \exp\left(-\frac{228180}{RT}\right) C_{toluene} C_H^{0.5}$ | -۴۸۸۰۰ (۱۱) |

۴- مدل سازی راکتورهای چندمنظوره

در این پژوهش، برای هر قسمت از راکتور بصورت جداگانه معادلات موازنه های جرم و انرژی نوشته شده و به کمک معادلات دیگر و همچنین داده های مسئله حل خواهند شد. به منظور ساده سازی معادلات جرم و انرژی، فرضیات زیر در نظر گرفته می شوند:

- برای هر قسمت از راکتور متشکل از قسمت تبدیل کاتالیستی، قسمت هیدرودی آلکیلاسیون و قسمت نفوذ از مدل هموزن و یک بعدی استفاده می شود.

- به علت در نظر نگرفتن غیرفعال شدن کاتالیست در فرایند تبدیل کاتالیستی، فرض حالت پایا برای راکتورها در نظر گرفته می شود.

- با در نظر گرفتن ایزوله کردن راکتورها، از اتلاف گرما توسط سطح خارجی راکتورها صرف نظر می گردد.

- جریان های گازی در هر قسمت راکتور به عنوان گاز ایده آل در نظر گرفته خواهند شد.

- پخش محوری انتقال جرم و حرارت ناچیز در نظر گرفته می شود.

- نفوذ شعاعی جرم و انرژی ناچیز است.

- انتقال حرارت ناشی از نفوذ هیدروژن در مقابل ترم های

دیگر معادله انرژی صرف نظر می گردد.

۴-۱- معادلات حاکم بر قسمت میانی راکتور چندمنظوره

(فرایند تبدیل کاتالیستی)

معادله موازنه جرم برای تمام اجزای قسمت تبدیل

کاتالیستی نفتا به صورت زیر است:

$$\frac{1}{A_{C,2}} \frac{dF_{i,2}}{dz} = \rho_b \sum_j v_{ij} r_j - \alpha \frac{\pi D_2}{A_{C,2}} J_{H_2} \quad (12)$$

در معادله بالا، J_{H_2} میزان شار نفوذی مولی هیدروژن را

نشان داده و از قانون Sievert به دست می آید [۱۲]:

شیمیایی صورت نمی‌گیرد، بنابراین معادله موازنه جرم فقط مربوط به گاز هیدروژن نوشته خواهد شد:

$$\frac{dF_{H_2,3}}{dz} = (\pi D_2) J_{H_2} \quad (20)$$

در نهایت مشخصات قسمت نفوذ و گاز جاروکننده در جدول ۶ گزارش شده است.

جدول (۶) مشخصات گاز جاروکننده در قسمت خارجی راکتور (قسمت نفوذ)

| واحد | مقدار عددی | پارامتر |
|--------|------------|-------------------------------------|
| kmol/h | ۲۷ | دبی مولی گاز جاروکننده در هر بستر |
| kPa | ۱۰۰۰، ۸۰۰ | فشار ورودی در بسترهای اول و دوم |
| μm | ۳۰، ۳۰ | ضخامت غشای در بسترهای اول و دوم |
| - | ۶۹/۵۰ | ترکیب درصد هیدروژن در گاز جاروکننده |

۵- نتایج و مباحث

۵-۱- اعتبارسنجی مدل

در معادلات دیفرانسیل معمولی ذکر شده در قسمت قبل، اگر مقدار ضریب انتقال حرارت کلی و همچنین شار نفوذی هیدروژن از دیواره غشایی را برابر صفر در نظر بگیریم، در این صورت به مدل ریاضی ساده شده‌ای برای راکتورهای معمولی فرایند تبدیل کاتالیستی می‌رسیم. برای حل معادلات این سیستم از نرم‌افزار MATLAB و روش رانج-کوتای مرتبه چهارم استفاده شده است. نتایج حل این معادلات بر مبنای دمای خروجی راکتورها و میزان آروماتیک تولیدی در جدول ۷ ارائه شده است. همان‌طور که در این جدول مشاهده می‌شود، نتایج شبیه‌سازی راکتورهای معمولی (دماهای خروجی راکتورها و جزء مولی آروماتیک در محصول ریفورمیت) تطابق خوبی با داده‌های صنعتی دارد [۱۴].

۵-۲- نتایج

در شکل ۳ (الف و ب) دبی مولی اجزای اصلی فرایند گرماگیر (تبدیل کاتالیستی نفتا) شامل پارافین، نفتن، آروماتیک و هیدروژن در طول راکتورهای معمولی و چندمنظوره رسم شده است. در این شکل پروفایل دبی مولی پارافین را در طول سه راکتور سری برای هر دو سیستم معمولی و سیستم جدید پیشنهادی نشان داده است. پارافین از مهم‌ترین واکنش‌دهنده‌های فرایند تبدیل کاتالیستی نفتا است. به همین دلیل انتظار می‌رود که میزان دبی مولی این توده در طول راکتورها کاهش یا بد. کوپل حرارتی فرایند تبدیل

۴-۲- معادلات حاکم بر قسمت داخلی راکتور چندمنظوره (فرایند هیدرودی‌آکیلاسیون متازیلین)

معادلات موازنه جرم و انرژی برای فرایند هیدرودی‌آکیلاسیون متازیلین به ترتیب به صورت زیر است:

$$\frac{1}{A_{C,1}} \frac{dF_{i,1}}{dz} = \sum v_{ij} R_j \quad (16)$$

$$\frac{C_{P,1}}{A_{C,1}} \frac{d(F_{tot,1} T_1)}{dz} = \sum R_{i,1} (-\Delta H_{f,i}) - \frac{(\pi D_1)}{A_{C,1}} U_{1-2} (T_1 - T_2) \quad (17)$$

در روابط (۱۴) و (۱۷)، U_{1-2} ضریب کلی انتقال حرارت است و طبق معادله زیر محاسبه می‌گردد [۱۵]:

$$\frac{1}{U_{1-2}} = \frac{1}{h_1} + \frac{A_1 \ln(D_2/D_1)}{2\pi L k_w} + \frac{A_1}{A_2} \frac{1}{h_2} \quad (18)$$

در رابطه بالا، h ضریب انتقال حرارت جابجایی اجباری و برای بسترهای ثابت پر شده توسط رابطه زیر تعیین می‌شود [۱۶]:

$$h = 4 \left(\frac{k_t}{d_p} \right) \left(\frac{\rho u_g d_p}{\mu} \right)^{0.365} \quad (19)$$

مشخصات قسمت هیدرودی‌آکیلاسیون متازیلین و ابعاد قسمت داخلی راکتور چند منظوره در جدول ۵ آورده شده است.

جدول (۵) مشخصات خوراک و ابعاد قسمت داخلی راکتور (فرایند هیدرودی‌آکیلاسیون)

| واحد | مقدار عددی | پارامتر |
|---|------------|-------------------------------------|
| kmol/h | ۲۳۰/۶ | دبی مولی خوراک |
| - | ۰/۵، ۰/۵ | جزء مولی خوراک در بسترهای اول و دوم |
| K | ۸۸۵ | دمای ورودی |
| kPa | ۲۵۵۰ | فشار ورودی |
| m | ۶/۲۹، ۳/۳۲ | قطر و طول بستر اول |
| m | ۷/۱۳، ۳/۹۵ | قطر و طول بستر دوم |
| ترکیب درصد مولی اجزا در خوراک هیدرودی‌آکیلاسیون | | |
| - | ۳۳/۳۳ | متازیلین |
| - | ۶۶/۶۶ | هیدروژن |

۴-۳- معادلات حاکم بر قسمت خارجی راکتور چندمنظوره (گاز جاروکننده)

گاز جاروکننده در قسمت خارجی راکتورهای چند منظوره (قسمت خارجی) متشکل از گاز هیدروژن و گازهای سبک جدا شده از ریفورمیت توسط جداکننده در فرایند تبدیل کاتالیستی نفتا است. با توجه به اینکه در این قسمت واکنش

مدل سازی و شبیه سازی راکتورهای پیشنهادی چندمنظوره برای بهبود تولید آروماتیک ها در فرایند تبدیل کاتالیستی نفتا

با توجه به بالا بودن دما در محیط راکتورهای چندمنظوره نسبت به راکتورهای صنعتی فرایند تبدیل کاتالیستی نفتا، سرعت مصرف نفتن در راکتورهای جدید بیشتر است. همچنین در این شکل، پروفایل دبی مولی آروماتیک به عنوان محصول اصلی فرایند نیز رسم شده است. جلوگیری از افت دما در طول فرایند تبدیل کاتالیستی به علت تماس غیرمستقیم آن با یک فرایند گرمازا، همچنین افزایش سرعت واکنش رفت در واکنش تعادلی اول باعث افزایش تولید آروماتیک می گردد. جزء مولی آروماتیک در ریفرمیت که منجر به افزایش کیفیت بنزین تولیدی می شود، در راکتورهای چندمنظوره نسبت به راکتورهای معمولی حدود ۱۸٪ افزایش می یابد. دبی مولی آروماتیک تولیدی در این سیستم پیشنهادی به $142/7 \text{ kmol/h}$ می رسد. میزان تولید آروماتیک در هر دو نوع راکتور در بستر اول بیشتر از دو بستر دیگر است. زیرا در راکتور اول واکنش تعادلی هیدروژن زدایی از نفتن غالب است.

کاتالیستی نفتا با فرایند بسیار گرمازای هیدرودی آلکیلاسیون متنازایلن منجر به افزایش سرعت واکنش هیدروکراکینگ پارافین (واکنش چهارم) می گردد. از طرف دیگر به علت استخراج هیدروژن به عنوان محصول جانبی فرایند گرماگیر از محیط این فرایند توسط غشای پالادیومی، واکنش تعادلی دوم به سمت تولید بیشتر محصولات پیشروی خواهد کرد. بنابراین پارافین بیشتری مصرف می شود. بنابراین سرعت مصرف پارافین در راکتورهای چندمنظوره نسبت به راکتورهای معمولی فرایند تبدیل کاتالیستی بیشتر است. سرعت واکنش پارافین در هر دو نوع راکتورهای معمولی و چندمنظوره در راکتور آخر بیشتر خواهد بود. این بدان معناست که در راکتورهای آخر، سرعت واکنش هیدروکراکینگ این شبه جزء نسبت به واکنش های دیگر فرایند بالاتر است. در راکتورهای معمولی فرایند تبدیل نفتا میزان تبدیل پارافین حدود ۱۴/۸٪ است؛ در حالی که میزان تبدیل پارافین در این سیستم جدید برابر با ۴۳/۷٪ می باشد. میزان کاهش دبی مولی نفتن در طول راکتورها در شکل ۳ رسم شده است.

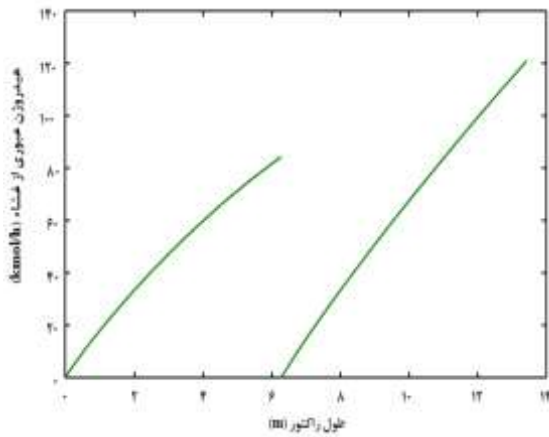
جدول ۷- مقایسه بین داده های پیش بینی شده و داده های صنعتی برای کاتالیست تازه فرایند ریفرمینگ کاتالیستی

| راکتور | دمای ورودی (K) | فشار ورودی (kPa) | جزء وزنی کاتالیست در بسترها (wt%) | ترکیب درصد خوراک نفتا |
|--------|----------------|------------------|-----------------------------------|--------------------------------|
| ۱ | ۷۷۷ | ۳۷۰۳ | ۲۰ | پارافین ۴۹/۳ |
| ۲ | ۷۷۷ | ۳۵۳۵ | ۳۰ | نفتن ۳۶/۰ |
| ۳ | ۷۷۵ | ۳۴۰۱ | ۵۰ | آروماتیک ۱۴/۷ |
| راکتور | داده صنعتی | دمای خروجی | داده صنعتی | ترکیب درصد آروماتیک در ریفرمیت |
| | | راکتور معمولی | راکتور معمولی | راکتور معمولی |
| | | کوپل | کوپل | کوپل |
| | | غشایی | غشایی | غشایی |
| ۱ | ۷۲۲ | ۷۲۲/۸ | ۷۵۲/۶ | - |
| ۲ | ۷۵۳ | ۷۳۴/۱ | ۷۸۱/۹ | - |
| ۳ | ۷۷۰ | ۷۶۳/۳ | ۷۸۳/۴ | ۶۵/۰ |

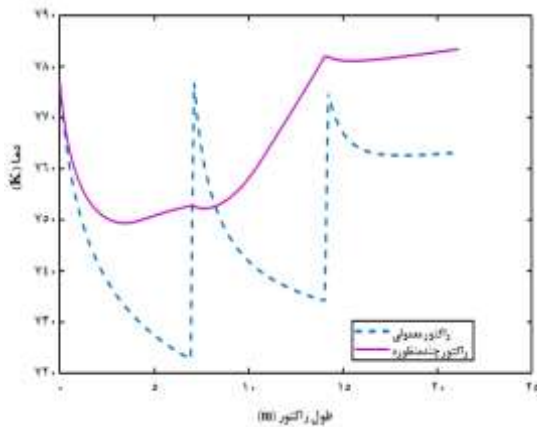
آن به قسمت خارجی، میزان این گاز در طول فرایند تبدیل کاتالیستی (قسمت میانی) کنترل شده و بنابراین دبی مولی هیدروژن در این راکتورها کمتر از راکتورهای معمولی بستر ثابت این فرایند است. ولی در کل با وجود غشا در راکتورهای چندمنظوره میزان تولید هیدروژن نسبت به راکتورهای معمولی افزایش بیشتری خواهد داشت.

در شکل ۴ دبی مولی هیدروژن نفوذی از قسمت میانی به قسمت نفوذ در دو راکتور چندمنظوره نشان داده شده است. میزان هیدروژن نفوذی توسط غشا در راکتور دوم بیشتر از

در شکل ۳ (الف و ب) پروفایل دبی مولی هیدروژن در طول راکتورهای معمولی و چندمنظوره ارائه شده است. در راکتورهای معمولی با وجود مصرف هیدروژن در واکنش های هیدروکراکینگ پارافین و نفتن، ولی باز هم در فرایند تبدیل کاتالیستی میزان این گاز در طول راکتورها افزایش می یابد. در واقع نرخ تولید گاز هیدروژن در واکنش اول (دی هیدروژناسیون نفتن به آروماتیک) بیشتر از نرخ مصرف آن در واکنش های سوم و چهارم است. در راکتورهای چندمنظوره به دلیل نفوذ بخشی از هیدروژن تولیدی در فرایند توسط غشای پالادیومی و انتقال



شکل (۴) دبی مولی هیدروژن نفوذی توسط غشای پالادیومی

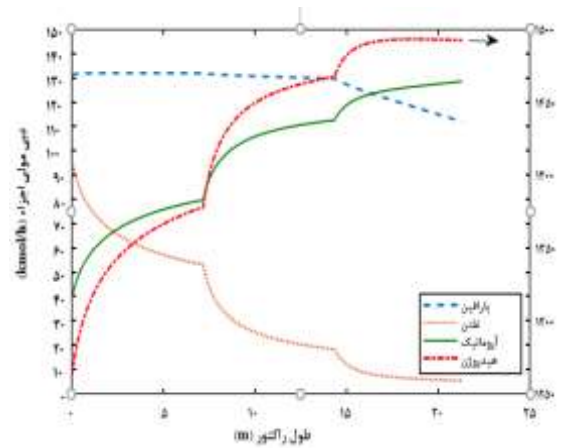


شکل (۵) پروفایل دمای فرایند تبدیل کاتالیستی نفتا برای هر دو سیستم معمولی و چندمنظوره.

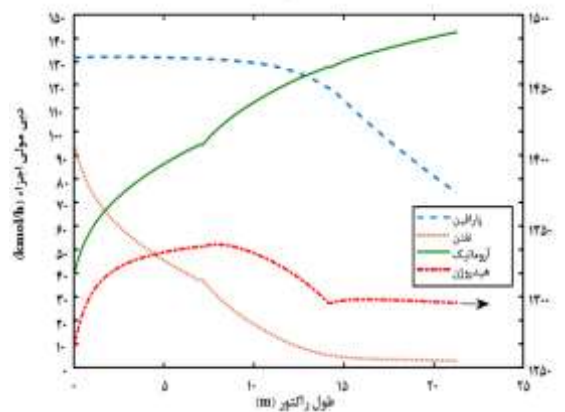
همان‌گونه که در این شکل دیده می‌شود، نفتا با دمای ورودی 777 K وارد بستر اول شده و با دمای $722/8\text{ K}$ از این بستر خارج خواهد شد. به منظور ادامه انجام واکنش‌ها بر روی کاتالیست پلاتین در بستر دوم نیاز به گرم کردن دوباره جریان خروجی از بستر اول است. وظیفه افزایش دمای جریان تا رسیدن به شرایط عملیاتی مطلوب بر عهده کوره‌هایی است که بین بسترها تعبیه می‌کنند. دمای جریان ورودی به بستر دوم دوباره به 777 K رسیده و واکنش‌های کاتالیستی فرایند در بستر دوم انجام خواهد شد. مبدل گرمایی دیگری بین بسترهای دوم و سوم نصب شده تا وظیفه‌ای مشابه با مبدل اول را انجام دهد. نمودار تغییرات دمایی فرایند تبدیل کاتالیستی نفتا در راکتورهای چندمنظوره هم در شکل ۵ رسم شده است. خوراک نفتا در شرایطی مشابه با حالت معمولی در دمای 777 K و فشار 370.3 kPa وارد بستر اول خواهد شد. در ورودی بستر اول به دلیل آن‌که میزان سرعت واکنش‌های گرماگیر در فرایند

راکتور اول است. زیرا اختلاف فشار جزئی هیدروژن بین قسمت‌های میانی و خارجی راکتور دوم بیشتر از راکتور اول می‌باشد. در شکل ۵ پروفایل دمایی فرایند تبدیل کاتالیستی برای هر دو نوع سیستم معمولی و جدید ارائه شده است. با توجه به ماهیت گرماگیر بودن فرایند، دما در طول مدت انجام واکنش‌های فرایند کاهش می‌یابد.

(الف)



(ب)



شکل (۳) پروفایل دبی مولی اجزای فرایند تبدیل کاتالیستی نفتا در (الف) راکتورهای معمولی و (ب) راکتورهای پیشنهادی

مدل سازی و شبیه سازی راکتورهای پیشنهادی چندمنظوره برای بهبود تولید آروماتیک ها در فرایند تبدیل کاتالیستی نفتا

شکل (۶) الف) پروفایل دبی مولی اجزای اصلی فرایند هیدرودی آلکیلاسیون و ب) پروفایل دمایی این فرایند

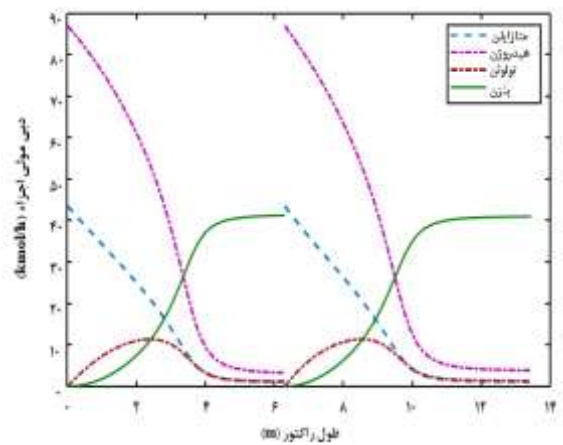
همان طور که در شکل هم مشخص است، در مجموع دمای فرایند تبدیل کاتالیستی در حالت بهبود یافته بیشتر از حالت معمولی است و این عامل مهمی در افزایش تولید آروماتیک در این سیستم پیشنهادی می باشد.

در شکل ۶-الف میزان تغییرات دبی های مولی متزایلین، هیدروژن، تولوئن و بنزن در فرایند گرمزای هیدرودی آلکیلاسیون در این سیستم بر حسب طول راکتورها ارائه شده است. در ورودی قسمت داخلی راکتورهای چند منظوره سرعت واکنش اول (تبدیل متزایلین به تولوئن توسط واکنش با هیدروژن) تقریباً بالا است. اما در طول فرایند گرمزای هیدرودی آلکیلاسیون، سرعت واکنش تبدیل متزایلین به تولوئن بیشتر از سرعت واکنش تبدیل تولوئن به بنزن می باشد. میزان تبدیل نهایی متزایلین در دو راکتور چند منظوره به ترتیب برابر با ۰/۹۷۵۴ و ۰/۹۷۲۴ است. این بدان معناست که فرایند گرمزای هیدرودی آلکیلاسیون متزایلین تقریباً به صورت کامل در راکتورهای چندمنظوره انجام می گیرد. میزان تبدیل بالای متزایلین منجر به افزایش تولید بنزن به عنوان محصول دلخواه فرایند گرمزا می باشد. در این شکل پروفایل هیدروژن در فرایند هیدرودی آلکیلاسیون نیز رسم شده است. همان طور که قبلاً هم بیان شد، هیدروژن مورد نیاز برای انجام واکنش های گرمزای فرایند هیدرودی آلکیلاسیون از هیدروژن استخراج شده از فرایند ریفرمینگ کاتالیستی توسط غشای پالادیومی تامین می گردد. در نمودار پروفایل دبی مولی هیدروژن بر حسب طول بستر در قسمت داخلی راکتورهای چندمنظوره نیز کاملاً واضح است که به علت کند شدن سرعت واکنش ها در انتهای راکتورها، در نتیجه سرعت مصرف هیدروژن در این قسمت نسبت به ابتدای راکتورها بسیار کمتر می شود.

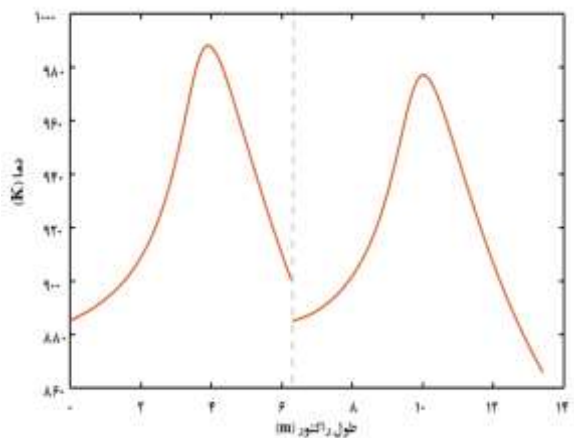
میزان دبی مولی تولوئن نیز به عنوان ماده واسطه در شکل ۶-الف نشان داده شده است. همانطور که در این شکل دیده می شود، پروفایل ها دارای پیک هستند. دلیل آن هم این است که تولوئن در واکنش اول از واکنش متزایلین با هیدروژن تولید شده و از طرف دیگر در واکنش دوم تولوئن با هیدروژن واکنش داده و مصرف خواهد شد. شکل ۶-الف هم دبی مولی بنزن را در طول راکتورهای چندمنظوره نشان می دهد. میزان دبی مولی بنزن تولید شده در اواخر بسترها تقریباً ثابت باقی می ماند.

کاتالیستی بسیار بالا است؛ بنابراین میزان مصرف گرما داخل محیط فرایند خیلی بیشتر از میزان انتقال گرما از فرایند گرمزای هیدرودی آلکیلاسیون متزایلین توسط دیواره جامد به آن است. به همین دلیل در ابتدا دمای قسمت میانی راکتور چندمنظوره افت می کند. پس از آن هر چه از فرایند می گذرد انتقال حرارت از قسمت داخلی راکتور چندمنظوره به قسمت میانی آن نقش مهم تری نسبت به مصرف گرما در قسمت میانی راکتور ایفا کرده و در نتیجه پروفایل دمایی شروع به رشد می کند. در بستر دوم به علت اینکه در فرایند معمولی مبدل های بین مرحله ای باعث بالا بردن دمای خوراک در ورودی آن شده است، در ابتدا دمای حالت معمولی کمی بیشتر از حالت جدید است. همان طور که در شکل مشخص است، دمای بستر سوم به اندازه کافی زیاد است و در صورت استفاده از راکتور چند منظوره به جای راکتور معمولی پر شده دمای فرایند تبدیل کاتالیستی نفتا به شدت زیاد شده و باعث ایجاد نقاط داغ و آسیب رسیدن به سایت های فعال کاتالیست ها می شود. از طرف دیگر هزینه های عملیاتی فرایند هم به نسبت بالا می رود. به همین دلیل ترجیح داده شده است که راکتور سوم یک بستر معمولی پر شده باشد.

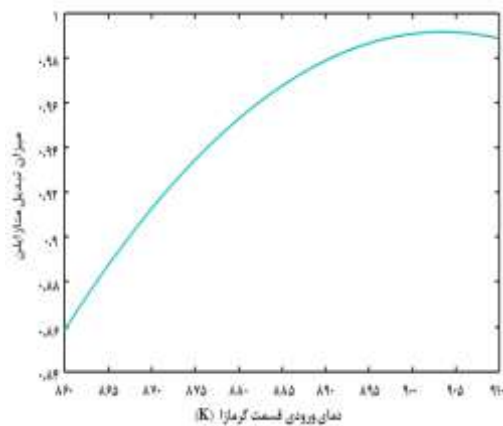
الف)



ب)



ب)



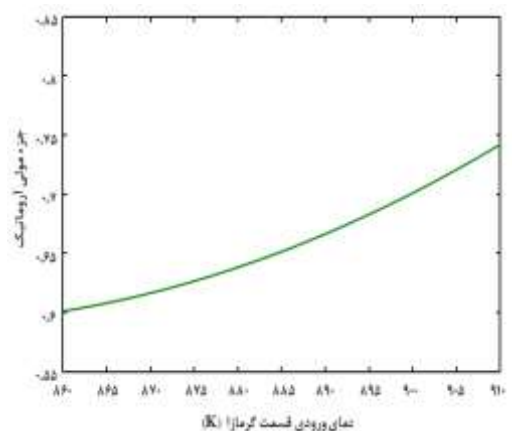
شکل (۷) اثر دمای ورودی خوراک قسمت گرمازا بر روی جزء مولی آروماتیک در ریفورمیت و میزان تبدیل متازایلین

با توجه به این شکل در ضخامت غشای ثابت و برابر با μm ۳۰، با افزایش ۱۰ درجه‌ای دمای خوراک فرایند هیدرودی-آلکیلاسیون از 870 K تا 880 K ، میزان تبدیل متازایلین حدود $5/4\%$ بیشتر می‌گردد. افزایش دمای خوراک متازایلین سبب زیاد شدن اختلاف دمای بین فرایند تبدیل کاتالیستی و هیدرودی-آلکیلاسیون خواهد شد. در واقع میزان نیروی محرکه برای انتقال گرما از قسمت داخلی به قسمت میانی راکتورهای چندمنظوره زیاد می‌شود. با بالا رفتن نیروی محرکه انتقال گرما، به طور طبیعی فرایند تبدیل کاتالیستی بهبود خواهد یافت. این موضوع در شکل ۷-الف نشان داده شده است. در این شکل اثر افزایش دمای خوراک قسمت داخلی بر روی جزء مولی آروماتیک در محصول نهایی ریفورمیت در فرایند تبدیل نفتا مورد مطالعه قرار گرفته است. طبق توضیحات فوق، بالا بردن دمای ورودی قسمت گرمازا باعث افزایش میزان تولید آروماتیک در محصول خروجی می‌گردد. در ضخامت غشای ثابت و برابر با $30\ \mu\text{m}$ ، با افزایش ۱۰ درجه‌ای دمای خوراک فرایند هیدرودی-آلکیلاسیون از 870 K تا 880 K ، جزء مولی آروماتیک در ریفورمیت حدود $3/6\%$ بیشتر می‌شود.

پروفایل دمایی برای فرایند هیدرودی-آلکیلاسیون متازایلین در طول دو راکتور چندمنظوره (قسمت داخلی) در شکل ۶-ب ارائه شده است. دمای ورودی خوراک متازایلین در ورودی بسترهای داخلی برابر 885 K در نظر گرفته شده است. در ابتدا به دلیل ماهیت گرمزای فرایند هیدرودی-آلکیلاسیون، دمای قسمت داخلی راکتور چندمنظوره زیاد می‌شود. در واقع میزان انرژی تولید شده بر اثر انجام واکنش‌های گرمازا در قسمت داخلی راکتورها خیلی بیشتر از میزان انرژی خارج شده از محیط فرایند خواهد بود. با پیشروی فرایند هیدرودی-آلکیلاسیون و کاهش سرعت واکنش‌های آن، حالا انرژی منتقل شده از فرایند به فرایند گرماگیر توسط دیواره جامد با ضریب هدایت حرارتی بالا غالب می‌شود. در نتیجه در پروفایل‌های دمایی در راکتورهای جدید یک پیک ظاهر خواهد شد. دمای ماکزیمم در بسترهای اول و دوم به ترتیب در نقاط $3/92\text{ m}$ و $10/02\text{ m}$ از بالای بسترها و برابر با 988 K و 976 K می‌باشد. نکته دیگر این است که با توجه به بیشتر بودن دمای ماکزیمم در راکتور اول نسبت به راکتور دوم، انتظار می‌رود که میزان تبدیل متازایلین در راکتور اول اندکی بیشتر از راکتور دوم باشد.

در شکل ۷ (الف و ب) تاثیر دمای ورودی خوراک متازایلین در قسمت داخلی راکتورهای چندمنظوره را بر روی عملکرد این راکتورهای جدید بررسی شده است. سرعت فرایند گرمزای هیدرودی-آلکیلاسیون متازایلین به بنزن با افزایش دمای خوراک ورودی به راکتور زیاد می‌شود. افزایش سرعت فرایند هیدرودی-آلکیلاسیون منجر به افزایش میزان تبدیل متازایلین خواهد شد (شکل ۷-ب).

الف)



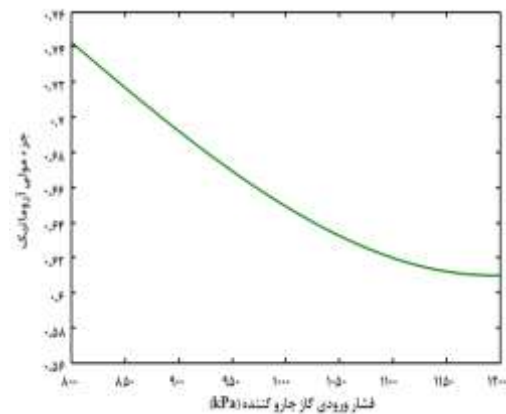
متنازایلن با افزایش فشار ورودی گاز جاروکننده در قسمت نفوذ افت می‌کند. این حقیقت در شکل ۸-ب نشان داده شده است.

۶- نتیجه‌گیری

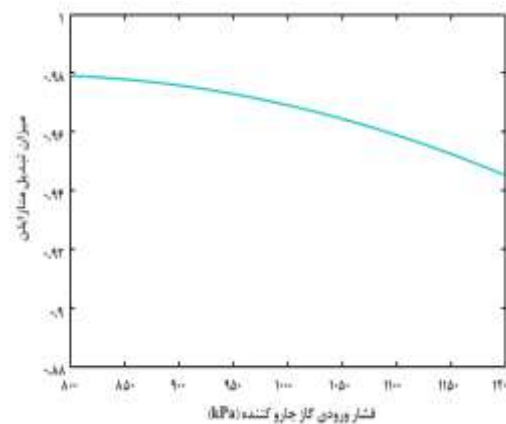
در این پژوهش راکتورهای چندمنظوره برای بهبود فرایند تبدیل کاتالیستی نفتا مورد بررسی و ارزیابی قرار گرفته است. پیشنهاد شد که این راکتورهای پیشنهادی از سه کانال (قسمت) تشکیل شود: در قسمت داخلی فرایند بسیار گرم‌مای هیدرودی-آلکیلاسیون متنازایلن انجام می‌گیرد. این قسمت توسط دیواره جامد با ضریب هدایت حرارتی نسبتاً بالا از قسمت میانی که در آن فرایند کاتالیستی گرماگیر صورت می‌گیرد جدا شده است. در قسمت خارجی این راکتورها گاز جاروکننده با فشار دلخواه جریان داشته و توسط یک دیواره غشایی از جنس پالادیوم از قسمت میانی جدا می‌شود.

در این راکتورهای جدید میزان تولید آروماتیک و هیدروژن در فرایند تبدیل کاتالیستی نفتا به دو دلیل افزایش پیدا خواهد کرد: یکی دریافت گرما توسط این فرایند از فرایند حرارتی هیدرودی‌آلکیلاسیون متنازایلن و افزایش سرعت واکنش‌های فرایند تبدیل کاتالیستی، و دیگری استخراج بخشی از هیدروژن از محیط فرایند تبدیل کاتالیستی و هدایت واکنش-های تعادلی این فرایند به سمت تولید آروماتیک و هیدروژن بیشتر. از مدل یک‌بعدی و هموزن برای شبیه‌سازی راکتورهای چند منظوره استفاده گردیده و نتایج عددی این شبیه‌سازی به صورت نمودارهایی ارائه شده است. دبی مولی آروماتیک تولید شده در فرایند تبدیل کاتالیستی در راکتورهای جدید $11/3\%$ بیشتر از راکتورهای معمولی است. همچنین میزان تبدیل نهایی متنازایلن در راکتورهای اول و دوم به ترتیب برابر با 9754% و 9724% می‌باشد.

(الف)



(ب)



شکل ۸) اثر فشار ورودی گاز جاروکننده بر روی جزء مولی آروماتیک در ریفرمیت و میزان تبدیل متنازایلن

شکل ۸-الف تغییرات جزء مولی آروماتیک در ریفرمیت خروجی از فرایند تبدیل کاتالیستی نفتا را در فشارهای ورودی مختلف گاز جاروکننده به راکتور اول بررسی کرده است. مشخص است که با بالا رفتن فشار ورودی گاز جاروکننده در راکتورهای چندمنظوره اختلاف فشار جزئی گاز هیدروژن بین دو قسمت میانی و نفوذ کم می‌شود. هر چه دبی مولی هیدروژن استخراج شده از قسمت میانی کمتر باشد، سرعت واکنش تعادلی اول در جهت رفت کاهش یافته و بنابراین میزان تولید آروماتیک در ریفرمیت افت می‌کند. از طرف دیگر با کاهش سرعت فرایند تبدیل نفتا، دمای قسمت میانی راکتورهای چندمنظوره کاهش می‌یابد. این کاهش دما در قسمت میانی باعث زیاد شدن اختلاف دمای بین دو قسمت میانی و داخلی راکتور شده و در نتیجه شار انتقال حرارت خروجی از فرایند هیدرودی‌آلکیلاسیون متنازایلن می‌گردد. بنابراین میزان تبدیل

| علائم لاتین | | علائم یونانی | |
|-------------|--|----------------|--|
| P_t | فشار کل (kPa) | α | ثابت (۱ برای هیدروژن و ۰ برای اجزای دیگر) |
| Q_0 | ثابت نفوذ از لایه غشا ((Pa ^{0.5})(m)(s) | ε | تخلخل بستر (-) |
| A_C | سطح مقطع راکتور (m ²) | μ | ویسکوزیته (kg/(m)(s)) |
| C_i | غلظت جزء i (kmol/m ³) | ρ | دانسیتته گاز (kg/m ³) |
| C_p | ظرفیت گرمایی ویژه ((kJ/(kmol)(K)) | ρ_b | دانسیتته بستر (kg/m ³) |
| d_p | قطر ذره کاتالیست (m) | δ_{H_2} | ضخامت غشا (m) |
| D_1 | قطر داخلی راکتور (m) | ΔH | گرمای واکنش (kJ/kmol) |
| D_2 | قطر میانی راکتور (m) | | زیرنویس‌ها |
| E_p | انرژی فعالیت نفوذ (kJ/kmol) | 1 | قسمت داخلی راکتور |
| F_i | دبی مولی جزء i (kmol/h) | 2 | قسمت میانی راکتور |
| h | ضریب انتقال گرمای جابجایی (W/(m ²)(K)) | 3 | قسمت خارجی راکتور |
| J_{H_2} | شار مولی نفوذی هیدروژن ((mol/(m ²)(s)) | i | جزء i |
| | ثابت سرعت واکنش‌های رفت در فرایند ریفورمینگ کاتالیستی: (cat.) (MPa) (kmol/(h)(kg cat.)) برای واکنش دوم و ((kmol/(h)(kg cat.)) برای واکنش‌های سوم و چهارم | j | قسمت j |
| | ثابت سرعت برای واکنش‌های فرایند هیدرودی‌آلکیلاسیون ((m ^{1.5} /(kmol ^{0.5})(h)) | | |
| | ضریب هدایت حرارتی فاز گاز (W/(m)(K)) | | |
| | ضریب هدایت حرارتی دیواره داخلی راکتور (W/(m)(K)) | | |
| | ثابت‌های تعادلی در واکنش‌های فرایند ریفورمینگ کاتالیستی (MPa) برای واکنش اول و (MPa ⁻¹) برای واکنش دوم | | |
| | طول راکتور (m) | | |
| | تعداد متوسط کربن در خوراک نفتا (-) | | |
| | فشار جزئی جزء i (kPa) | | |

[16] D. Wen, Y. Ding, Heat transfer of gas flow through a packed bed, *Chemical Engineering Science*, 61 (2006) 3532-3542.

[1] G.J. Antos, A.M. Aitani, *Catalytic naphtha reforming, revised and expanded*, CRC Press, 2004.

[2] J. Anabtawi, D. Redwan, A. Al-Jarallah, A. Aitani, Advances in the chemistry of catalytic reforming of naphtha, *Fuel science & technology international*, 9, ۲۳-۱ (۱۹۹۱)

[3] D. Bommaman, R. Srivastava, D. Saraf, Modelling of catalytic naphtha reformers, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 67 (1989) 405-411.

[4] G.P. Vathi, K.K. Chaudhuri, Modelling and simulation of commercial catalytic naphtha reformers, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 75 (1997) 930-937.

[5] I. Elizalde, J. Ancheyta, Dynamic modeling and simulation of a naphtha catalytic reforming reactor, *Applied Mathematical Modelling*, 39 (2015) 764-775.

[6] R. Saeedi, D. Iranshahi, Multi-objective optimization of thermally coupled reactor of CCR naphtha reforming in presence of SO₂ oxidation to boost the gasoline octane number and hydrogen, *Fuel*, 206 (2017) 580-592.

[7] A.K. Mostafazadeh, M. Rahimpour, A membrane catalytic bed concept for naphtha reforming in the presence of catalyst deactivation, *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 48 (2009) 683-694.

[8] D. Iranshahi, R. Saeedi, K. Azizi, M. Nategh, A novel integrated thermally coupled moving bed reactors for naphtha reforming process with hydrodealkylation of toluene, *Applied Thermal Engineering*, 112 (2017) 1040-1056.

[9] R. Saeedi, D. Iranshahi, Hydrogen and aromatic production by means of a novel membrane integrated cross flow CCR naphtha reforming process, *International Journal of Hydrogen Energy*, 42 (2017) 7957-7973.

[10] R. Smith, Kinetic analysis of naphtha reforming with platinum catalyst, *Chem. Eng. Prog.*, 55 (1959) 76-80.

[11] A. Weiss, L. Doelp, Kinetics of catalytic xylene hydrodealkylation, *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, 3 (1964) 73-78.

[12] J. Shu, B.P. Grandjean, S. Kaliaguine, Methane steam reforming in asymmetric Pd-and Pd-Ag/porous SS membrane reactors, *Applied Catalysis A: General*, 119 (1994) 305-325.

[13] R.B. Bird, W.E. Stewart, E.N. Lightfoot, *Transport phenomena*, John Wiley & Sons, 2007.

[14] V. Meidanshahi, A.M. Bahmanpour, D. Iranshahi, M.R. Rahimpour, Theoretical investigation of aromatics production enhancement in thermal coupling of naphtha reforming and hydrodealkylation of toluene, *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 50 (2011) 893-903.

[15] F.P. Incropera, A.S. Lavine, T.L. Bergman, D.P. DeWitt, *Fundamentals of heat and mass transfer*, Wiley, 2007.

Modeling and Simulation of Proposed Multifunctional Reactors to Increase the Aromatics Production in the Catalytic Naphtha reforming

Mahdi Shakeri ¹, Davood Iranshahi ^{2,*}

Department of Chemical Engineering, Amirkabir University of Technology (Tehran Polytechnic, Tehran, Iran

ABSTRACT

In this research, improvement of catalytic naphtha reforming as one of the important processes in refineries and petrochemicals industries has been considered. The main focus is on replacing the conventional packed-bed reactors with new multifunctional reactors. These proposed reactors include catalytic naphtha reforming and methaxylene hydrodealkylation processes separated by a solid wall and a sweep gas section separated from naphtha reforming by a Pd-Ag membrane layer. The endothermic naphtha reforming, on the one hand, exchanges heat with the methaxylene hydrodealkylation, while on the other hand, it performs hydrogen exchange by sweep gas section. According to the simulation results, the aromatic production in the proposed system was increased by about 11% compared to conventional reactors. Finally, the effects of operating conditions such as feed temperature of hydrodealkylation process, sweep gas inlet pressure on the performance of the system have been studied.

ARTICLE INFO

Article history:

Received: September 1, 2019

Received in revised form: January 25, 2020

Accepted: March 12, 2020

Key words:

Catalytic Naphtha Reforming Process

Multifunctional Reactor

Palladium Membrane

Methaxylene Hydrodealkylation Process

Aromatic Production

* Corresponding author

iranshahi@aut.ac.ir

All right reserved.