

شبیه‌سازی و بهبود عملکرد واحد مرکاپتان‌زدایی شرکت گاز پارس جنوبی به کمک طراحی یک سیکل فرآیندی جدید

رضا سیدآبادی، بهاره بیدار، محمد رضا سردشتی بیرجندی، فرهاد شهرکی*

گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی شهید نیکبخت، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان، ایران

چکیده

هدف از این پژوهش ارائه یک سیکل فرآیندی جدید بر پایه یک مرحله پیش فشارزنی به منظور بهبود عملکرد فرآیند جداسازی مرکاپتان از جریان گاز طبیعی در شرکت گاز پارس جنوبی است. شبیه‌سازی فرآیند جداسازی بر پایه جذب سطحی به روش تناوب فشار-دما (PTSA) با استفاده از نرم‌افزار Aspen Adsorption انجام گردید. نتایج نشان داد که استفاده از این سیکل بهبود یافته سبب کاهش توان مصرفی کمپرسور به میزان $36/83\%$ نسبت به سیکل فعلی گردید. همچنین با افزایش دبی خوراک ورودی و دمای مرحله گرمایش دوم در هر دو سیکل میزان بهره جداسازی مرکاپتان‌ها افزایش داده شد. بدین صورت که بیشترین بهره جداسازی ($7/7\%$) در دبی $2/3 \text{ kmol/hr}$ و به میزان ($7/9\%$) در دمای 298°C حاصل گردید. لذا نتایج نشان داد که تأثیر دما در افزایش بهره جداسازی بیشتر از افزایش دبی ورودی است.

مشخصات مقاله

تاریخچه مقاله:

دریافت: ۱۴ آبان ۱۳۹۹

دریافت پس از اصلاح: ۱۸ اسفند ۱۳۹۹

پذیرش نهایی: ۲۶ اردیبهشت ۱۴۰۰

کلمات کلیدی:

فرآیند مرکاپتان‌زدایی

جذب سطحی تناوب دما - فشار

سیکل فرآیندی بهبود یافته

نرم‌افزار Aspen Adsorption

* نویسنده عهده دار مکاتبات:

fshahraki@eng.usb.ac.ir

حقوق ناشر محفوظ است.

۱- مقدمه

اکسیژن از هوا با روش جذب سطحی ایجاد شد، امکان پذیر نشد. پس از آن سیستم‌های مختلفی بر پایه جذب سطحی سیلیکی در ابعاد صنعتی مورد استفاده قرار گرفت. در فرآیندهای سیلیکی که از ستون‌های جاذب استفاده می‌شود، ستون‌های جاذب برای استفاده مجدد در فرآیند بر طبق دوره‌های تناوبی مشخص احیا می‌شوند. مکانیسم احیا بنا به نوع سیستم گازی که قرار است جداسازی شود متفاوت است. بطور مثال، می‌تواند براساس تناوب (افزایش و کاهش) فشار^۳، تناوب فشار خلاء^۴، تناوب دما^۵ و همچنین تناوب فشار-دما^۶ باشد. در عملیات جداسازی سیلیکی، ستون‌های جاذب معمولاً براساس یک برنامه زمان‌بندی شده مشخص متحمل مراحل افزایش فشار، جذب سطحی، کاهش فشار، احیا و بالاخره استفاده تناوبی مجدد می‌شوند. بنابراین، سلسله مراحل جداسازی و احیا مرتباً در حال اجرا می‌باشد.

برگ و همکاران [۵] در سال ۲۰۱۹ در یک پژوهش به بررسی اجمالی تصفیه گاز طبیعی از ترکیبات نامطلوب با استفاده از فرآیند جذب سطحی تناوب دما پرداختند. در این پژوهش میزان جذب مرکاپتان‌ها از جریان گاز طبیعی بر روی بستر غربال مولکولی از نوع زئولیت 13X و همچنین دیگر جاذب‌ها مانند ژل سیلیکا-آلومینا بررسی شد. نتایج تحقیقات این نویسندگان نشان داد که بسترهای زئولیتی بیشترین میزان جذب را نسبت به مرکاپتان‌ها از خود نشان می‌دهند.

چاونیتز و همکاران [۶] حذف آب و مرکاپتان از جریان گاز طبیعی به روش جذب سطحی با استفاده از بستر ژل سیلیکا-آلومینا مورد بررسی قرار دادند. آنها گزارش کردند که دینامیک فرآیند جذب رقابتی بخار آب و مرکاپتان توسط جذب سطحی آب کنترل می‌شود.

طاهری و همکاران [۷] حذف متیل مرکاپتان از جریان گاز طبیعی با استفاده از جاذب MIL-53(AI) را مورد بررسی قرار دادند. این محققان در مطالعات خود به این نتیجه رسیدند که جاذب استفاده شده انتخاب‌پذیری بالایی جهت جذب متیل مرکاپتان دارد به گونه‌ای که توانایی جذب بیش از ۹mmol/g متیل مرکاپتان را دارد که این مقدار ۲-۳ برابر نسبت به جاذب صنعتی 13X بیشتر می‌باشد و بنابراین، این جاذب می‌تواند به عنوان یک جاذب مطلوب برای فرآیند تصفیه گاز طبیعی به روش جذب سطحی تناوب فشار (PSA) مورد استفاده قرار گیرد.

گاز طبیعی به عنوان یک محصول استراتژیک نیازمند فرآوری به منظور آماده‌سازی جهت مصرف می‌باشد. متان جزء اصلی گاز طبیعی است، اما علاوه بر متان اجزای دیگری نظیر اتان، پروپان، بوتان، پنتان و اجزای سنگین‌تر از پنتان، آب، دی‌اکسیدکربن و همچنین ترکیبات سولفوری نیز در گاز طبیعی وجود دارند. در مولکول‌های حاوی ترکیبات سولفور بیش‌ترین سهم متعلق به سولفید هیدروژن است. اما ترکیبات گوگردی (مرکاپتان‌ها) و همچنین به میزان کمتری سولفید کربونیل نیز ممکن است وجود داشته باشد که سبب تولید گاز ترش می‌شوند. مرکاپتان‌ها و به عبارت دقیق‌تر گروه‌های تیول^۱، ترکیباتی دارای فرمول R-S-H هستند که R می‌تواند یک گروه آروماتیک و یا آلکیل باشد. این ترکیبات معمولاً در جریان‌های گازی موجود در فرآیندهای پتروشیمی‌ها و پالایشگاه‌ها یافت می‌شود و دارای بوی ناخوشایند و نامطبوع هستند. آن‌ها در حالی که خورنده هستند، به دلیل ایجاد خاصیت چسبندگی مانع ثبات سوخت و پایداری آن می‌شوند [۱]. برای حذف مرکاپتان‌های موجود در گاز طبیعی روش‌های مختلفی وجود دارد، اما متداول‌ترین روش‌هایی که برای این منظور بکار می‌روند، شامل روش واکنش شیمیایی (اکسیداسیون مرکاپتان‌ها) و روش جذب سطحی می‌باشد. روش شیمیایی که بر پایه تکنولوژی مراکس^۲ است، روش قدیمی‌تر برای حذف مرکاپتان‌ها از گاز طبیعی است و با وجود سادگی و هزینه‌ی اقتصادی پایین، معایب و مشکلات خاص خود را دارد. روش جذب سطحی، روش نسبتاً جدیدی است که بدون استفاده از حلال و واکنش شیمیایی و بر پایه فرآیند جذب سطحی با جاذب عمل می‌کند. مکانیسم جداسازی در سیستم‌های جذب سطحی بر پایه خاصیت انتخاب‌پذیری جاذب‌ها استوار است. مادامیکه ترکیبی از مولکول‌های چند گاز در شرایط دما و فشار مناسب در مجاورت توده‌ای از ذرات جاذب قرار گیرد، جاذب قادر است تا یک یا چند جزء را بصورت انتخابی و براساس اندازه مولکول‌ها و همچنین بر هم‌کنش‌های بین مولکولی به خود جذب کند [۲و۳].

در سال‌های اخیر استفاده از روش‌های جذب سطحی سیلیکی به منظور تهیه محصول با خلوص بسیار بالا به شدت افزایش داشته است. اولین بار روش جذب سطحی سیلیکی توسط خیل [۴] در سال ۱۹۴۲ برای خشک کردن هوا مورد استفاده قرار گرفت. اما استفاده صنعتی از این روش تا سال ۱۹۶۴ که اولین کارخانه تولید

4 Vacuum swing

5 Temperature swing

6 Pressure-temperature swing

1 Thiol

2 Mercox

3 Pressure swing

جریان گاز طبیعی استفاده می‌شود، بررسی کنیم. فرآیند توسط نرم‌افزار Aspen Adsorption شبیه‌سازی شده است. علاوه بر این به بررسی تاثیر متغیرهای عملیاتی که شامل دبی خوراک ورودی و همچنین دمای مرحله گرمایش دوم بر میزان بهبود بهره جداسازی مرکاپتان‌ها پرداخته شده است.

۲- فرآیند مرکاپتان‌زدایی

این سیستم شامل شش برج بوده که هر بستر مشتمل بر یک لایه از جاذب زئولیت 13X و یک لایه آلومینای فعال است. در سلسله مراتب فرآیندی، گاز خشک شده از واحد نم‌زدایی گاز به این عملیات وارد می‌شود. مدت زمان فرآیند جذب در هر برج ۱۸ ساعت می‌باشد. هر بستر بعد از انجام مرحله جذب سطحی به منظور استفاده مجدد، طی مراحل از پیش مشخص احیا می‌شود. بدین منظور جریان گاز مورد نیاز در مراحل احیا با استفاده از تقریباً شش درصد جریان مولی محصول خروجی تأمین می‌شود. روال این مرحله بدین صورت است که جریان گاز احیا پس از عبور از ستونی که می‌بایست خنک شود وارد یک کوره شده تا دمای لازم به منظور گرمایش بستر در مرحله دوم گرمایش تأمین شود. سپس این جریان وارد برج دیگر شده و بعد از گرم کردن آن در یک مبدل حرارتی به دمای مورد نیاز مرحله اول گرمایش مجدداً سرد می‌شود.

۳- معادلات حاکم در مسئله

اصلی‌ترین فرضیاتی که در مدل‌سازی استفاده شده‌اند عبارتند از:

۱- برای توصیف دینامیکی رفتار گاز از معادله حالت SRK^3 استفاده می‌شود [۱۳].

۲- خواص فیزیکی جاذب در طول فرآیند ثابت در نظر گرفته شد [۱۳].

۳- مدل جریان گاز براساس مدل قالبی پراکنده محوری فرض می‌شود [۱۴].

۴- از مدل تعادلی لانگمویر توسعه یافته ۲ موجود در نرم‌افزار Aspen Adsorption برای توصیف رابطه تعادلی بین فاز گاز و جامد استفاده می‌شود [۱۴].

۵- سرعت انتقال جرم توسط روابط نیروی محرکه خطی (LDF) بیان می‌شود [۱۴].

۶- برای محاسبه افت فشار بستر از معادله ارگان که دقت مناسبی برای جریان آرام و آشفته دارد استفاده می‌شود [۱۴].

فتحی و همکاران [۸] عملکرد جاذب 13X-HP/Zn در حذف اتیل مرکاپتان از گاز طبیعی را با استفاده از نرم‌افزار Minitab بررسی کردند. آن‌ها در این نرم‌افزار با مشخص نمودن فاکتورهای موثر عملیاتی از قبیل غلظت فلز روی، دما و فشار بر میزان جذب مرکاپتان به این نتیجه رسیدند که اصلاح جاذب توسط فلز روی اثر مثبتی بر روی جداسازی دارد.

شیخ‌عالیوند [۹] طراحی واحد پیش تصفیه گاز طبیعی ورودی به واحد گاز طبیعی مایع^۱ (LNG) را با استفاده از یک سیستم جذب سطحی تناوب دما-فشار^۲ (PTSA) جهت نم‌زدایی، مرکاپتان‌زدایی و شیرین‌سازی مورد بررسی قرار داد. در مطالعات این نویسنده هر بستر جذب متشکل از سه لایه جاذب بود. مکانیزم این روش به این صورت بود که گاز در لایه ابتدایی (آلومینای فعال) به صورت نسبی از قطرات مایع خشک و سپس گاز وارد لایه دوم شده (غربال مولکولی 4A) و کاملاً خشک می‌گردد. نهایتاً گاز کاملاً خشک وارد لایه سوم (غربال مولکولی 13X) شده و تمامی ترکیبات گوگردی آن به خصوص مرکاپتان‌ها حذف می‌شوند. نتایج پژوهش این تحقیق نشان داد که برج جذب پیشنهادی به خوبی قادر است در شرایطی عملیاتی نامساعد گاز طبیعی را تا حد موردنیاز به صورت هم‌زمان شیرین‌سازی و نم‌زدایی کند.

ژو و همکاران [۱۰] یک زئولیت اصلاح شده فلزی برای حذف عمیق ترکیبات گوگردی نظیر مرکاپتان از گاز طبیعی پیشنهاد دادند. بر این اساس ظرفیت جذب زئولیت 13X اصلاح شده با استفاده از فلزاتی نظیر نقره و مس به میزان قابل توجهی نسبت به زئولیت 13X افزایش یافت. لذا توانستند یک جاذب کم هزینه برای تصفیه گاز طبیعی در کاربردهای صنعتی ارائه دهند.

مطهری و همکاران [۱۱] به شناخت سنتیک واکنش و بررسی تأثیر عوامل مختلف بر روند آن در واحدهای حذف کننده مرکاپتان پرداختند. آن‌ها براساس داده‌های آزمایشگاهی که از واحد مراکس بدست آمده بود سرعت واکنش را ارزیابی کردند. نتایج نشان داد که یون مرکاپتان (RS-) سرعت واکنش اکسیداسیون را محدود می‌کند و اولین مرتبه را در معادله سرعت دارد.

لیو و همکاران [۱۲] یک کاتالیزور جدید کربن فعال شده با Fe-N برای حذف اتیل مرکاپتان‌ها ساختند. تمامی محصولات اکسیداسیون و همچنین اتیل مرکاپتان‌ها توسط کاتالیزور جذب شدند.

در این مقاله قصد داریم، سیکل جدیدی شامل استفاده از یک مرحله پیش فشار زنی را در عملیات جذب سطحی تناوب فشار-دما موجود در شرکت گاز پارس جنوبی جهت مرکاپتان‌زدایی از

³ Soave-Redlich-Kwong equation of state

¹ Liquefied natural gas

² Pressure-Temperature Swing Adsorption

۱-۳- موازنه جرم

موازنه جرم جزء نام فاز گاز به فرم زیر نوشته می‌شود:

$$-D_L \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} + \frac{\partial(u.C_i)}{\partial z} + \frac{\partial C_i}{\partial t} + \rho_p \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \right) \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial t} = 0 \quad (1)$$

عبارت $\frac{\partial \bar{q}_i}{\partial t}$ در معادلات فوق توسط رابطه LDF و به شکل زیر

بیان می‌گردد:

$$\frac{\partial \bar{q}_i}{\partial t} = \omega_i \cdot (\dot{q}_i - \bar{q}_i) \quad (2)$$

در معادله بالا:

ω_i : ضریب معادله LDF برای جزء نام گاز

\dot{q}_i : غلظت جزء i گاز در فاز جامد برای هنگامی که حالت تعادل بین غلظت در فاز جذب شده و غلظت در فاز گاز برقرار است، می‌باشد.

\dot{q}_i توسط معادله لانگمویر توسعه یافته ۲ در نرم افزار Aspen

Adsorption به فرم زیر تعریف می‌گردد:

$$Q_i = \frac{q_i^*}{q_{m,i}} = \frac{B_{0,i} \exp\left(\frac{\Delta H_i}{RT}\right) \cdot p \cdot y_i}{1 + \sum_{j=1}^n B_{0,j} \exp\left(\frac{\Delta H_j}{RT}\right) \cdot p \cdot y_j} \quad (3)$$

$q_{m,i}$ مقدار غلظت بیشینه جزء i در فاز جامد، B_i ضریب

جذب یا ضریب لانگمویر برای جزء i ، B_j ضریب جذب یا ضریب لانگمویر برای دیگر اجزا، P فشار کل، y_i جزء مولی جزء i در فاز گاز و y_j جزء مولی دیگر اجزا در فاز گاز می‌باشد.

هم چنین پارامتر B_i توسط روابط زیر تعیین می‌گردند:

$$B_i = B_{0,i} \exp\left(\frac{\Delta H_i}{RT}\right) \quad (4)$$

که ΔH_i آنتالپی جذب و $B_{0,i}$ ثابت ضریب جذب می‌باشد.

موازنه‌ی جرم کلی فاز گاز به فرم زیر نوشته خواهد شد [۱۹-۱۵].

$$-D_L \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + \frac{\partial(u.C)}{\partial z} + \frac{\partial C}{\partial t} + \rho_p \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \right) \sum_{i=1}^N \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial t} = 0 \quad (5)$$

۲-۳- موازنه انرژی

موازنه انرژی به صورت زیر نوشته خواهد شد [۱۹-۱۵].

$$-K_L \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \varepsilon \cdot \rho_g \cdot c_{p,g} \cdot \left(u \frac{\partial T}{\partial z} + T \frac{\partial u}{\partial z} \right) + (\varepsilon \cdot \rho_g \cdot c_{p,g} + \rho_B \cdot c_{p,s}) \cdot \frac{\partial T}{\partial t} - \rho_B \cdot \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \bar{q}_i}{\partial t} \cdot (-\Delta H_i) \right) = 0 \quad (6)$$

در رابطه فوق ρ_g دانسیته گاز، $c_{p,g}$ ظرفیت گرمایی گاز، T دمای سیستم، K_L ضریب پراکندگی حرارتی محوری می‌باشد. همچنین ε_i ضریب مجموع ضریب تخلخل بستر و دانه‌های جاذب و $c_{p,s}$ نیز ظرفیت گرمایی فاز جامد (جاذب) و ρ_B دانسیته توده و $\Delta \bar{H}_i$ تغییر آنتالپی جذب سطحی برای جزء i می‌باشد.

۳-۳- شرایط اولیه و مرزی

شرایط اولیه در سیکل ابتدایی، دما و فشار را برابر با دما و فشار خوراک در نظر گرفته شد و مقدار غلظت جذب شونده در بستر برای تمام اجزا صفر در نظر گرفته شد. در سیکل n م، مقادیر اولیه غلظت در فاز گاز و جامد برابر با مقدار آن با زمان انتهایی مرحله قبل می‌باشد.

$$\begin{aligned} C_i(z, 0) &= C_{i,ncycle-1}^{end}; \quad \bar{q}_i(z, 0) = q_{i,ncycle-1}^{end}; \\ u(z, 0) &= u_{i,ncycle-1}^{end}; \quad P(z, 0) = P_{i,ncycle-1}^{end}; \\ T(z, 0) &= T_{i,ncycle-1}^{end} \end{aligned} \quad (7)$$

که $C_{i,ncycle-1}^{end}$ مقادیر در زمان انتهایی مرحله افزایش فشار می‌باشد. شرایط مرزی مراحل مختلف عملیات در جدول ۱ تعریف شده‌اند.

۳-۴- معادله افت فشار

برای محاسبه افت فشار در محاسبات از معادله ارگان استفاده شده است. این معادله برای جریان‌های آرام و آشفته دقت قابل قبولی دارد [۱۴].

$$\frac{\partial p}{\partial z} = \frac{-150 \times 10^{-5} \mu_g (1 - \varepsilon_b)^2}{(2r_p \psi)^2 \varepsilon_b^3} v_g + 1.75 \times 10^{-5} M_w \rho_g \times \frac{(1 - \varepsilon_b)}{2r_p \psi \varepsilon_b^3} v_g^2 \quad (8)$$

که ψ ضریب شکل جاذب، M_w جرم مولکولی مخلوط گاز، v_g سرعت سطحی مخلوط گاز، r_p شعاع ذره، μ_g ویسکوزیته مخلوط گاز، ε_b ضریب تخلخل بستر، ρ_g دانسیته گاز می‌باشد. همچنین، جدول ۲ مشخصات جاذب‌ها و بسترهای جذب سطحی را نشان می‌دهد.

جدول (۱) شرایط مرزی مراحل مختلف عملیات

| نوع مرحله | شرایط مرزی | # |
|-------------|-------------------------------------------------------------------------------|------|
| جذب | $C_i _{z=L} = C_F; \frac{\partial C_i}{\partial z} _{z=0} = 0$ | (۹) |
| | $T _{z=L} = T_F; \frac{\partial T}{\partial z} _{z=0} = 0$ | (۱۰) |
| | $u _{z=L} = u _{feed}; \frac{\partial u}{\partial z} _{z=0} = 0$ | (۱۱) |
| | $P _{z=L} = P_H$ | (۱۲) |
| کاهش فشار | $\frac{\partial C_i}{\partial z} _{z=0 \& L} = 0$ | (۱۳) |
| | $\frac{\partial T}{\partial z} _{z=0 \& L} = 0$ | (۱۴) |
| | $u _{z=0} = 0; \frac{\partial u}{\partial z} _{z=L} = 0$ | (۱۵) |
| | $P _{z=0} = P_L; \frac{\partial P}{\partial z} _{z=L} = 0$ | (۱۶) |
| گرمایش اول | $C_i _{z=0} = C_{H1}; \frac{\partial C_i}{\partial z} _{z=L} = 0$ | (۱۷) |
| | $T _{z=0} = T_{H1}; \frac{\partial T}{\partial z} _{z=L} = 0$ | (۱۸) |
| | $u _{z=0} = u _{H1}; u _{z=L} = 0$ | (۱۹) |
| | $P _{z=0} = P_L; \frac{\partial P}{\partial z} _{z=L} = 0$ | (۲۰) |
| گرمایش دوم | $C_i _{z=0} = C_{H2}; \frac{\partial C_i}{\partial z} _{z=L} = 0$ | (۲۱) |
| | $T _{z=0} = T_{H2}; \frac{\partial T}{\partial z} _{z=L} = 0$ | (۲۲) |
| | $u _{z=0} = u_{H2}; u _{z=L} = 0$ | (۲۳) |
| | $P _{z=0} = P_L; \frac{\partial P}{\partial z} _{z=L} = 0$ | (۲۴) |
| سرمايش | $C_i _{z=0} = C_c; \frac{\partial C_i}{\partial z} _{z=L} = 0$ | (۲۵) |
| | $T _{z=0} = T_c; \frac{\partial T}{\partial z} _{z=L} = 0$ | (۲۶) |
| | $u _{z=0} = u_c; u _{z=L} = 0$ | (۲۷) |
| | $P _{z=0} = P_L; \frac{\partial P}{\partial z} _{z=L} = 0$ | (۲۸) |
| افزایش فشار | $u _{z=L} = u _{feed}; u _{z=0} = 0$ مشابه با مرحله جذب، فقط با این تفاوت: | (۲۹) |

جدول (۲) پارامترهای استفاده شده برای شبیه‌سازی ریاضی واحد PTSA جداسازی مرکاپتان

| ردیف | پارامتر | مقدار | توضیحات و واحد ابعادی | مرجع |
|------|--------------------|----------|-------------------------------------------------------------|------|
| ۱ | L_1 | ۴/۶۵ | طول لایه جاذب زئولیت (m) | [۳] |
| ۲ | L_2 | ۰/۷۵ | طول لایه جاذب آلومینای فعال (m) | [۳] |
| ۲ | D_{in} | ۳/۷ | قطر درونی بستر جذب (m) | [۳] |
| ۳ | ε_1 | ۰/۳۷ | تخلخل لایه زئولیت (--) | [۳] |
| ۴ | ε_2 | ۰/۲۶ | تخلخل لایه آلومینا (--) | [۱۳] |
| ۵ | ε_{p1} | ۰/۲۴ | تخلخل دانه‌های زئولیت (--) | [۱۳] |
| ۶ | ε_{p2} | ۰/۲۸ | تخلخل دانه‌های آلومینا (--) | [۳] |
| ۷ | ρ_{p1} | ۶۹۰ | دانسیتته توده‌ای ذرات زئولیت (kg/m^3) | [۳] |
| ۸ | ρ_{p2} | ۸۲۰ | دانسیتته توده‌ای ذرات آلومینای فعال (kg/m^3) | [۳] |
| ۹ | R_{p1} | ۰/۰۰۲۱ | شعاع ذرات زئولیت (m) | [۳] |
| ۱۰ | R_{p2} | ۰/۰۰۲۳ | شعاع ذرات آلومینای فعال (m) | [۳] |
| ۱۱ | C_{ps1} | ۱/۰۷ | ظرفیت گرمایی ذرات زئولیت (kJ/kg.k) | [۳] |
| ۱۲ | C_{ps2} | ۳/۸۵ | ظرفیت گرمایی ذرات آلومینای فعال (kJ/kg.k) | [۳] |
| ۱۳ | y_{A0} | ۰/۸۶۳۳ | جزء مولی CH_4 در فاز گاز در زمان برابر با صفر (mol/mol) | [۳] |
| ۱۴ | y_{B0} | ۰/۰۵۴۶ | جزء مولی C_2H_6 در فاز گاز در زمان برابر با صفر (mol/mol) | [۳] |
| ۱۵ | y_{C0} | ۰/۰۳۲۸۴۴ | جزء مولی C_3H_8 در فاز گاز در زمان برابر با صفر (mol/mol) | [۳] |
| ۱۶ | y_{D0} | ۰/۰۱۳۳ | جزء مولی CO_2 در فاز گاز در زمان برابر با صفر (mol/mol) | [۳] |
| ۱۷ | y_{E0} | ۱۸ | جزء مولی H_2O در فاز گاز در زمان برابر با صفر (ppm) | [۳] |
| ۱۸ | y_{F0} | ۰/۰۳۵۸ | جزء مولی N_2 در فاز گاز در زمان برابر با صفر (mol/mol) | [۳] |
| ۱۹ | y_{G0} | ۴۸ | جزء مولی MMCAPT در فاز گاز در زمان برابر با صفر (ppm) | [۳] |
| ۲۰ | y_{H0} | ۹۰ | جزء مولی EMCAPT در فاز گاز در زمان برابر با صفر (ppm) | [۳] |
| ۲۱ | ΔH_{A1} | -۱۵۶۷۵ | گرمای جذب CH_4 بر روی زئولیت (kJ/kmol) | [۱۳] |
| ۲۲ | ΔH_{B1} | -۳۲۵۴۱/۲ | گرمای جذب C_2H_6 بر روی زئولیت (kJ/kmol) | [۱۳] |
| ۲۳ | ΔH_{C1} | -۳۲۵۴۱/۲ | گرمای جذب C_3H_8 بر روی زئولیت (kJ/kmol) | [۱۳] |
| ۲۴ | ΔH_{D1} | -۳۴۰۰۳/۱ | گرمای جذب CO_2 بر روی زئولیت (kJ/kmol) | [۱۳] |
| ۲۵ | ΔH_{E1} | -۶۲۵۲۵/۸ | گرمای جذب H_2O بر روی زئولیت (kJ/kmol) | [۱۳] |
| ۲۶ | ΔH_{F1} | -۱۵۷۱۶ | گرمای جذب N_2 بر روی زئولیت (kJ/kmol) | [۱۳] |
| ۲۷ | ΔH_{G1} | -۶۵۱۶۲/۴ | گرمای جذب MMCAPT بر روی زئولیت (kJ/kmol) | [۱۳] |
| ۲۸ | ΔH_{H1} | -۶۵۱۶۲/۴ | گرمای جذب EMCAPT بر روی زئولیت (kJ/kmol) | [۱۳] |

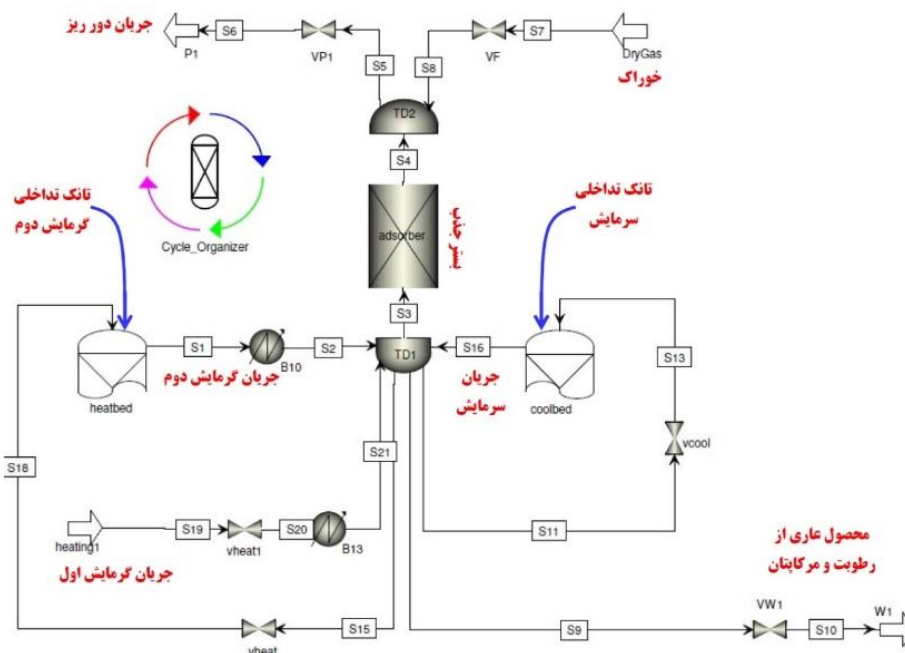
شبیه‌سازی و بهبود عملکرد واحد مرکاپتان‌زدایی شرکت گاز پارس جنوبی به کمک طراحی یک سیکل فرآیندی جدید

| | | | | |
|------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|-------------------|----|
| [۱۳] | گرمای جذب CO ₂ بر روی آلومینای فعال (kJ/kmol) | -۲۹۸۰۵ | ΔH_{D2} | ۲۹ |
| [۱۳] | گرمای جذب H ₂ O بر روی آلومینای فعال (kJ/kmol) | -۶۰۰۱۴ | ΔH_{E2} | ۳۰ |
| [۱۳] | پارامتر معادله‌ی لانگمویر توسعه یافته ۲ برای جذب CH ₄ بر روی زئولیت (kmol/kg) | ۰/۰۰۴۱۱ | q _{m,A1} | ۳۱ |
| [۱۳] | پارامتر معادله‌ی لانگمویر توسعه یافته ۲ برای جذب C ₂ H ₆ بر روی زئولیت (kmol/kg) | ۰/۰۰۲۸۲۱ | q _{m,B1} | ۳۲ |
| [۱۳] | پارامتر معادله‌ی لانگمویر توسعه یافته ۲ برای جذب C ₃ H ₈ بر روی زئولیت (kmol/kg) | ۰/۰۰۲۸۲۱ | q _{m,C1} | ۳۳ |
| [۱۳] | پارامتر معادله‌ی لانگمویر توسعه یافته ۲ برای جذب CO ₂ بر روی زئولیت (kmol/kg) | ۰/۰۰۵۱۱۵ | q _{m,D1} | ۳۴ |
| [۱۳] | پارامتر معادله‌ی لانگمویر توسعه یافته ۲ برای جذب H ₂ O بر روی زئولیت (kmol/kg) | ۰/۰۱۶۸۴۲ | q _{m,E1} | ۳۵ |
| [۱۳] | پارامتر معادله‌ی لانگمویر توسعه یافته ۲ برای جذب N ₂ بر روی زئولیت (kmol/kg) | ۰/۰۰۳۶۷۵ | q _{m,F1} | ۳۶ |
| [۱۳] | پارامتر معادله‌ی لانگمویر توسعه یافته ۲ برای جذب MMCAPT بر روی زئولیت (kmol/kg) | ۰/۰۰۳۵۸۰ | q _{m,G1} | ۳۷ |
| [۱۳] | پارامتر معادله‌ی لانگمویر توسعه یافته ۲ برای جذب EMCAPT بر روی زئولیت (kmol/kg) | ۰/۰۰۳۵۸۰ | q _{m,H1} | ۳۸ |
| [۱۳] | پارامتر معادله‌ی لانگمویر توسعه یافته ۲ برای جذب CO ₂ بر روی آلومینای فعال (kmol/kg) | ۰/۰۰۱۱ | q _{m,D2} | ۳۹ |
| [۱۳] | پارامتر معادله‌ی لانگمویر توسعه یافته ۲ برای جذب H ₂ O بر روی آلومینای فعال (kmol/kg) | ۰/۰۱۵۱ | q _{m,E2} | ۴۰ |
| [۱۳] | پارامتر معادله‌ی لانگمویر توسعه یافته ۲ برای جذب CH ₄ بر روی زئولیت (MPa ^{-۱}) | ۴/۳۴×۱۰ ^{-۴} | B _{0,A1} | ۴۱ |
| [۱۳] | پارامتر معادله‌ی لانگمویر توسعه یافته ۲ برای جذب C ₂ H ₆ بر روی زئولیت (MPa ^{-۱}) | ۳/۳۶×۱۰ ^{-۴} | B _{0,B1} | ۴۲ |
| [۱۳] | پارامتر معادله‌ی لانگمویر توسعه یافته ۲ برای جذب C ₃ H ₈ بر روی زئولیت (MPa ^{-۱}) | ۳/۳۶×۱۰ ^{-۴} | B _{0,C1} | ۴۳ |
| [۱۳] | پارامتر معادله‌ی لانگمویر توسعه یافته ۲ برای جذب CO ₂ بر روی زئولیت (MPa ^{-۱}) | ۳/۶۱×۱۰ ^{-۴} | B _{0,D1} | ۴۴ |
| [۱۳] | پارامتر معادله‌ی لانگمویر توسعه یافته ۲ برای جذب H ₂ O بر روی زئولیت (MPa ^{-۱}) | ۴/۸۲×۱۰ ^{-۷} | B _{0,E1} | ۴۵ |
| [۱۳] | پارامتر معادله‌ی لانگمویر توسعه یافته ۲ برای جذب N ₂ بر روی زئولیت (MPa ^{-۱}) | ۱/۷۹×۱۰ ^{-۴} | B _{0,F1} | ۴۶ |
| [۱۳] | پارامتر معادله‌ی لانگمویر توسعه یافته ۲ برای جذب MMCAPT بر روی زئولیت (MPa ^{-۱}) | ۴/۳۲×۱۰ ^{-۸} | B _{0,G1} | ۴۷ |
| [۱۳] | پارامتر معادله‌ی لانگمویر توسعه یافته ۲ برای جذب EMCAPT بر روی زئولیت (MPa ^{-۱}) | ۴/۳۲×۱۰ ^{-۸} | B _{0,H1} | ۴۸ |

می‌شود. جهت ایجاد جریان‌ات مربوط به مراحل گرمایش دوم و سرمایش از تانک‌های تداخلی استفاده شده است. در حین مرحله جذب مقداری از محصول خروجی از برج وارد این تانک‌ها شده و بالاخره از گاز ذخیره شده در مرحله گرمایش دوم و سرمایش استفاده می‌شود.

۴- نتایج و بحث

پس از ورود داده‌ها و مشخصات مورد نیاز شبیه‌سازی درون نرم‌افزار Aspen Adsorption، دیاگرام جریان فرآیند به صورت شکل ۱ بدست می‌آید. در این شکل به وضوح دیده می‌شود که خوراک گازی از بالای هر بستر وارد و محصول از پایین برج خارج



شکل (۱) شبیه‌سازی واحد صنعتی مرکباتان‌زدایی توسط نرم‌افزار Aspen Adsorption

همانگونه که در جدول ۳ دیده می‌شود، این فرآیند دارای یک مرحله غیر فعال (رست)^۲ به مدت زمان یک ساعت است که این خود می‌تواند در کاهش بهره^۳ فرآیند نقش بسزایی را داشته باشد. عملیات به گونه‌ای طراحی شده که کل مرحله جذب در مدت زمان ۱۸hr، کاهش و افزایش فشار هر کدام ۰/۵hr، گرمایش اول و دوم هر کدام ۶hr و سرمایش ۴hr به طول می‌انجامد.

محدوده‌ی دمایی عملیات بین ۴۰°C (مراحل کاهش و افزایش فشار)، ۴۰°C (جذب)، ۱۸۰°C (گرمایش اول) و ۲۹۰°C (گرمایش دوم) متغیر است و همچنین فشار عملیات بین حد پایین ۱۲/۸ bar (مراحل کاهش و افزایش فشار و احیا) و حد بالا ۶۸ bar (مرحله جذب) در طول فرآیند تغییر می‌کند. با رجوع به اطلاعات موجود در جدول (۳)، هر ستون مشتمل بر دو لایه جذب می‌باشد. به این صورت که ۴/۶۵ m ابتدای هر ستون با استفاده از ژئولیت 13X پر شده است و ۰/۷۵m مابقی حاوی آلومینای فعال می‌باشد.

به دلیل اینکه جریان گاز گرمایش اول حاصل از گازهای خروجی از مرحله گرمایش دوم می‌باشد، یک جریان مجزا با کسر مولی‌های برابر با گاز خروجی از مرحله گرمایش دوم در شبیه‌سازی ایجاد شده است. برای این کار، در ابتدا یک بار شبیه‌سازی اجرا شد و کسر مولی‌های اجزاء گاز در شرایط پایا سیکنلی^۱ (CSS) یادداشت شده و به عنوان شرایط ورودی گاز در مرحله اول گرمایش استفاده می‌گردد. شرایط CSS به شرایطی گفته می‌شود که شرایط عملیاتی (نظیر دما، فشار و کسر مولی اجزاء) در خروجی فرآیند با زمان تغییر قابل توجهی نداشته باشند [۲۰].

سلسله مراحل زمانی فرآیند به همراه وضعیت شیرهای کنترلی که حین عملیات برای هر ستون جذب بصورت مشابه به وقوع می‌پیوندد و در جدول ۳ نشان داده شده است. لازم به توضیح است، به علت اینکه مقداری از محصول سبک حین مرحله جذب جهت گرمایش و سرمایش سایر ستون‌ها استفاده می‌شود، بنابراین مرحله جذب به چهار قسمت تقسیم شده است تا بتوان مقداری از محصول سبک را به متناسب با زمان‌های مراحل گرمایش دوم و سرمایش در تانک‌های تداخلی ذخیره نمود. همچنین، جدول ۴ شرایط دما و فشار بسترها را در طول مراحل فرآیند نشان می‌دهد.

3. Gain

1. Cyclic steady state
2. Rest (Idle)

شبیه‌سازی و بهبود عملکرد واحد مرکاپتان‌زدایی شرکت گاز پارس جنوبی به کمک طراحی یک سیکل فرآیندی جدید

جدول (۳) جدول زمانی مراحل واحد صنعتی جهت شبیه‌سازی

| مراحل شیرها | ۱-بند | ۲-بند | ۳-بند | ۴-بند | کاهش فشار | گرمایش اول | گرمایش دوم | سرمایش | فشار زنی | رست |
|----------------|-------|-------|-------|-------|-----------|------------|------------|--------|----------|-----|
| VF | On | On | On | On | Off | Off | Off | Off | On | Off |
| VP1 | Off | Off | Off | Off | On | On | On | On | Off | Off |
| Vcool | Off | On | Off | Off | Off | Off | Off | Off | Off | Off |
| Vheat | Off | Off | On | Off | Off | Off | Off | Off | Off | Off |
| Vheat1 | Off | Off | Off | Off | Off | On | Off | Off | Off | Off |
| VW1 | On | On | On | On | Off | Off | Off | Off | Off | Off |

جدول (۴) شرایط دما و فشار ستون‌های جذب در طول فرآیند [۳]

| مراحل شرایط | ۱-بند | ۲-بند | ۳-بند | ۴-بند | کاهش فشار | گرمایش اول | گرمایش دوم | سرمایش | فشار زنی | رست |
|----------------|--------------------------------------|-------|-------|-------|-----------|-----------------------------|------------|--------|-------------|-----|
| زمان (min) | ۲۴۰ | ۲۴۰ | ۳۶۰ | ۲۴۰ | ۳۰ | ۳۶۰ | ۳۶۰ | ۲۴۰ | ۳۰ | ۶۰ |
| دما (°C) | ۴۰ | ۴۰ | ۴۰ | ۴۰ | ۴۰ | ۴۰→۱۸۰ | ۱۸۰→۲۹۰ | ۲۹۰→۴۰ | ۴۰ | ۴۰ |
| فشار (bar) | ۶۸ | ۶۸ | ۶۸ | ۶۸ | ۶۸→۱۲/۸ | ۱۲/۸ | ۱۲/۸ | ۱۲/۸ | ۱۲/۸→۶۸ | ۶۸ |
| دبی گاز ورودی | خوراک ورودی به هر بستر = ۲/۲ kmol/hr | | | | ۰ | معادل ۶٪ از محصول سبک خروجی | | | ۲/۲ kmol/hr | ۰ |

جدول (۵) مقایسه نتایج شبیه‌سازی با داده‌های واحد صنعتی براساس درصد مولی اجزا

| اجزا خوراک | نتایج حاصل از شبیه‌سازی براساس درصد مولی اجزا | نتایج خروجی واحد براساس درصد مولی اجزاء | درصد خطای نسبی |
|---------------|-----------------------------------------------|-----------------------------------------|----------------|
| متان | ۸۶/۹۲ | ۸۷/۱۹۷۲ | ۰/۳۲ |
| اتان | ۵/۲۹۵ | ۵/۲۱۴۳ | ۱/۶ |
| پروپان | ۳/۳۰۷ | ۳/۰۷۴۷ | ۷/۵ |
| متیل مرکاپتان | ۱/۳ | ۱/۳۱۵ | ۱/۱ |
| اتیل مرکاپتان | ۲/۴ | ۲/۴ | - |
| نیتروژن | ۳/۴۲ | ۳/۴۱۰۲ | ۲/۸ |
| آب | ۰/۸ | ۰/۸ | - |
| کربن دی‌اکسید | ۱/۰۴ | ۱/۱ | ۵/۴ |

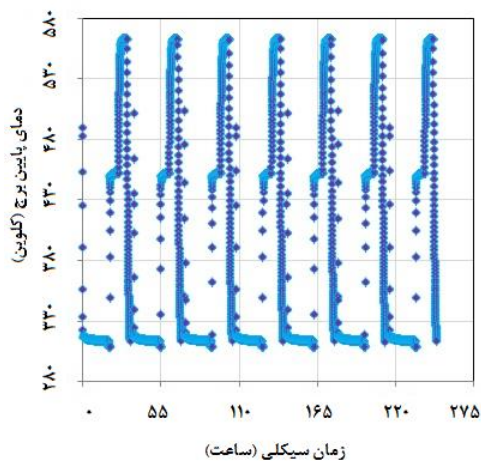
درصد) که این خود بیانگر صحت شبیه‌سازی می‌باشد. همچنین میزان مرکاپتان‌ها تا حد مجاز استاندارد یعنی کمتر از ۱۰ ppm کاهش یافته است. در بیشتر اجزا خطا کمتر از ۳ درصد است. در مورد دی‌اکسید کربن و پروپان مقدار خطا کمی بیشتر از ۳٪ است که این امر می‌تواند به دلیل خطا در داده‌های پارامتر ایزوترم تعادلی این دو جزء باشد. میانگین خطا برای کلیه محصولات ۳/۱۲٪ می‌باشد.

به منظور بررسی دقیق و اطمینان از صحت شبیه‌سازی، مقایسه‌ای بین داده‌های واقعی و نتایج حاصل از شبیه‌سازی صورت می‌گیرد.

در جدول ۵ نتایج حاصل از شبیه‌سازی برای جریان خروجی از واحد مرکاپتان‌زدایی با مقدار واقعی مقایسه گردید.

همان‌گونه که در جدول ۵ مشاهده می‌شود خلوص محصول اصلی واحد یعنی متان تا حد زیادی شبیه به داده‌های واقعی خروجی از واحد صنعتی می‌باشد (میزان خطا، کمتر از یک

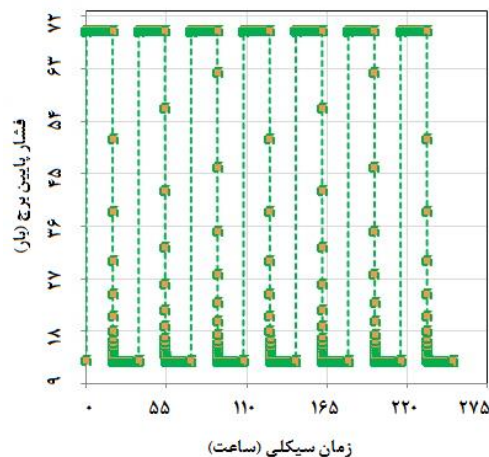
در برج جذب حین مراحل سیکلی به خوبی قابل رویت است. در حقیقت، نتایج شکل ۲ بیانگر صحت عملکرد رفتار فشار در برج جذب بر حسب زمان سیکلی است و می‌توان این اطمینان را کسب نمود که تناوب فشار به درستی و اصولی در طول فرآیند PTSA در حال انجام است.



شکل (۳) پروفایل سیکلی دمای پایین برج

به درستی برای فرآیند تعریف شده است و می‌توان انتظار داشت که جذب و دفع ستون‌های جذب به موقع و درست انجام شود. شکل‌های ۴ و ۵ نتایج شبیه‌سازی برای پروفایل سیکلی غلظت خروجی متیل مرکاپتان و اتیل مرکاپتان در پایین برج را نشان می‌دهند. در شروع عملیات که جاذب‌های موجود در ستون‌های جذب پاک و عاری از هر گونه جذب شونده اولیه هستند، ترکیبات جذب شونده سنگین (متیل مرکاپتان و اتیل مرکاپتان) به ندرت و اندک در خروجی مرحله جذب پدیدار می‌شوند.

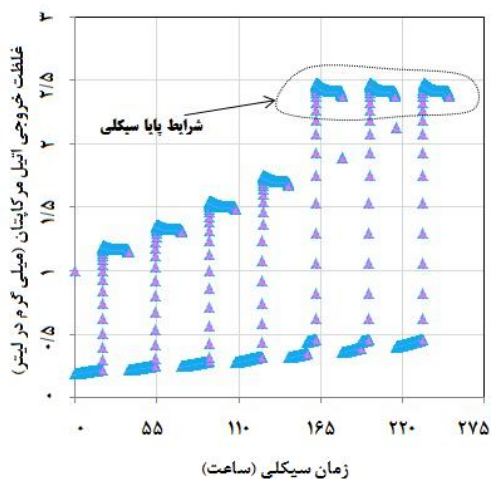
شکل ۲ نتایج شبیه‌سازی را برای پروفایل سیکلی فشار پایین برج جذب در طول عملیات جداسازی نمایش می‌دهد. براساس قاعده و انتظار، فشار در مرحله جذب در حد بالا (۶۸bar) و در مراحل احیا (گرمایش اول و دوم و سرمایش) دارای حد پایین (۱۲/۸bar) قرار دارد. در سایر نقاط (مراحل کاهش و افزایش فشار) فشار برج بر حسب زمان سیکلی در حال کاهش و یا افزایش می‌باشد. با توجه به نتایج این شکل، تناوب منظم فشار



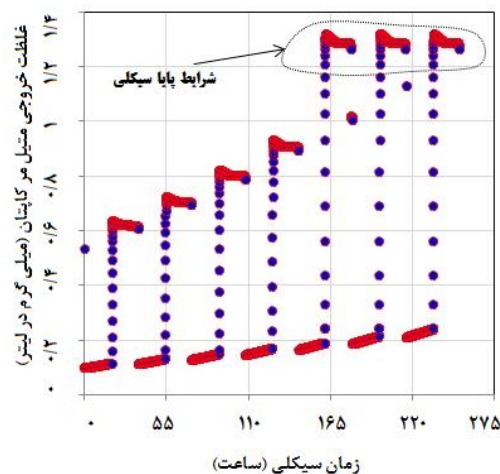
شکل (۲) پروفایل سیکلی فشار پایین برج

پروفایل دمایی پایین برج بر حسب زمان سیکلی در شکل ۳ آورده شده است. این نمودار نشان می‌دهد که حد کمینه دمای پایین برج در طول عملیات جداسازی در مراحل جذب، فشارزنی، سرمایش و رست به وقوع می‌پیوندد و برابر با 40°C (313 K) می‌باشد. از سوی مقابل، بالاترین دمای برج مربوط به مرحله گرمایش دوم و برابر با 290°C (563 K) است. نتایج شکل ۳ نیز همانند نتایج شکل ۲ درستی رفتار تناوبی برج در طول عملیات سیکلی را نشان می‌دهد. دمای برج در طول عملیات بصورت تناوبی و منظم در حال افزایش (احیا) و کاهش (جذب) است. بنابراین، نتایج شکل‌های ۲ و ۳ عملکرد صحیح یک فرآیند PTSA را برای عملیات جداسازی مورد مطالعه نشان می‌دهد.

این بدان معنی است که به کمک برنامه زمان‌بندی سیکلی دستورالعمل‌های کنترل دما و فشار برج برای عملیات جداسازی



شکل (۵) پروفایل سیکلی غلظت اتیل مرکاپتان در پایین برج



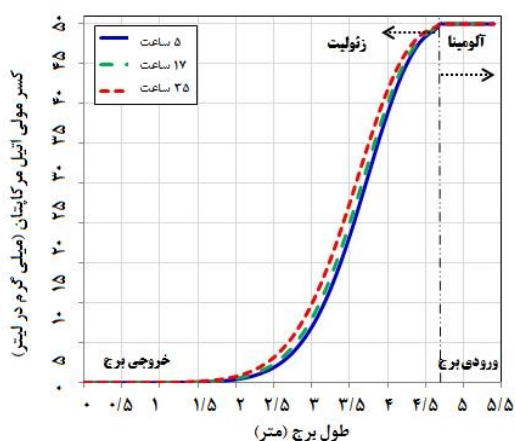
شکل (۴) پروفایل سیکلی غلظت متیل مرکاپتان در پایین برج

مرکاپتان‌ها در طول بستر آلومینا تقریباً بدون تغییر است در حالی که از ابتدا ورود به لایه جاذب زئولیتی شروع به نزول محسوس می‌نمایند. با توجه به نتایج این شکل‌ها، با گذشت زمان مرحله جذب و اندک افزایش اشباع‌شدگی بستر زئولیتی، نمودارهای کسر مولی به سمت غلظت‌های بالاتر انتقال می‌یابند. متیل مرکاپتان و اتیل مرکاپتان از مقادیر ورودی خود به ترتیب 48 ppm و 90 ppm در زمان‌های مختلف به مقدار نهایی کمتر از 1 ppm میل می‌کنند. در واقع، نتایج شبیه‌سازی‌ها بیانگر این موضوع است که عملکرد واحد صنعتی بر حسب حذف مرکاپتان‌ها بسیار مطلوب است. لازم به ذکر است، اطلاعات واحد صنعتی موجود نیز مقدار ($2/4 \text{ ppm}$) را گزارش نموده است.

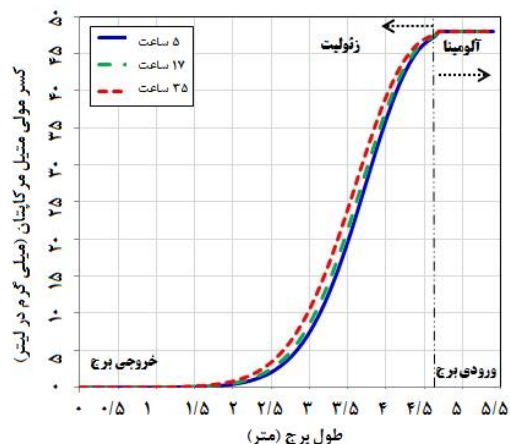
در شکل‌های ۸ و ۹ کسر مولی بخار آب به ترتیب به ازای کل برج جذب و لایه جاذب آلومینا در شرایط CSS نشان داده شده است. بر خلاف مرکاپتان‌ها، بخار آب عمدتاً در لایه جاذب آلومینا از جریان گاز حذف شده است. همچنین، مشابه با پروفایل کسر مولی مرکاپتان‌ها، در گذر زمان مرحله جذب منحنی‌های کسر مولی بخار آب به سمت غلظت‌های بالاتر انتقال یافته‌اند که دلیل آن هم همان اشباع جزئی جاذب در گذر زمان مرحله جذب می‌باشد. بعلاوه، نتایج نشان می‌دهند که عملکرد فرآیند PTSA مورد مطالعه در این پژوهش بر حسب حذف بخار آب نیز بطور مطلوب کارآمد است چرا که کسر مولی بخار آب در جریان گاز خروجی از بستر به کمتر از 1 ppm نزول یافته است.

با اشباع جزئی جاذب‌ها در طول عملیات سیکلی، غلظت مرکاپتان‌ها در خروجی مرحله جذب شروع به رشد و افزایش می‌کنند. شایان ذکر است، اصولاً به علت وجود حلقه هیسترسیس^۱ برای ایزوترم‌های جذب و دفع، مقدار مول جزء دفع شده الزاماً با مقدار مولی که در ابتدا جذب می‌شود نیست [۲۱]. بنابراین، با وجود اینکه بسترهای جذب براساس یک برنامه زمان‌بندی سیکلی احیا می‌شوند، همیشه یک مقدار گاز دفع نشده درون آن باقی می‌ماند که در نهایت منجر به کاهش ظرفیت ستون جاذب و بالاخره افزایش غلظت جزء سنگین (جذب شونده) در خروجی مرحله جذب می‌شود. این رفتار تغییرات غلظت خروجی بر حسب زمان تا جایی ادامه دارد که سیستم به شرایط پایا سیکلی (CSS) میل می‌نماید و از آن جا به بعد نمودارهای سیکلی غلظت دارای یک فرم تقریباً ثابت و منظم می‌شوند. در واقع، ثبت و گزارش نتایج شبیه‌سازی فرآیند مطالعه پیش رو به عنوان یک فرآیند سیکلی بایستی بعد از به وقوع پیوستن شرایط CSS باشد چرا که تنها در این شرایط است که می‌توان به نتایج شبیه‌سازی اطمینان داشت و در حقیقت، در عمل نیز چنین می‌باشد. بنابراین، علاوه بر اینکه نمودارهای شکل‌های ۴ و ۵ درستی رفتار تناوبی فرآیند را نشان می‌دهند، از این نتایج می‌توان دریافت که شرایط CSS در عملیات مورد مطالعه پس از گذشت پنج سیکل متوالی از ابتدای فرآیند رخ می‌دهد.

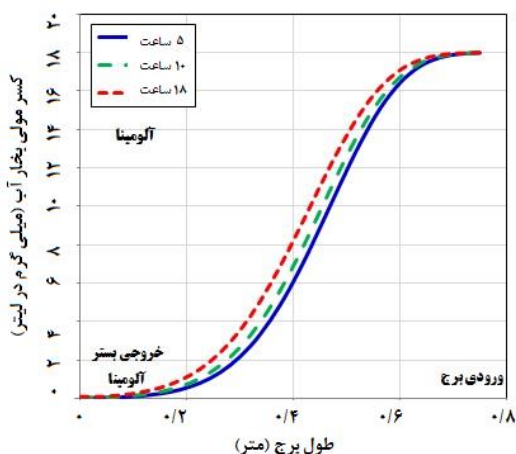
در شکل‌های ۶ و ۷ پروفایل‌های کسر مولی متیل مرکاپتان و اتیل مرکاپتان بر حسب طول برج جذب در شرایط CSS رسم شده است. همچنان که نتایج این شکل‌ها نشان می‌دهند، غلظت



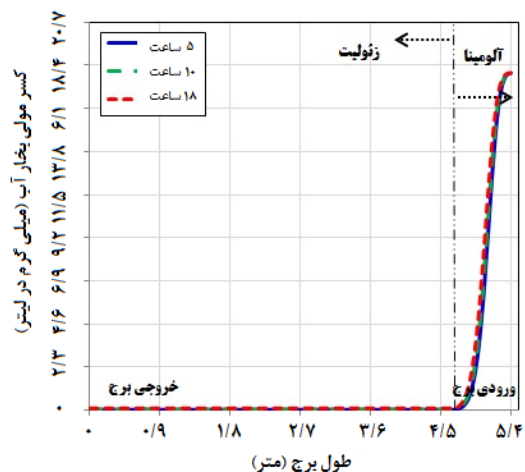
شکل (۷) پروفایل طولی کسر مولی اتیل مرکاپتان در بستر جذب



شکل (۸) پروفایل طولی کسر مولی متیل مرکاپتان در بستر جذب



شکل (۹) پروفایل طولی کسر مولی بخار آب در بستر آلومینا



شکل (۱۰) پروفایل طولی کسر مولی بخار آب در بستر جذب

در اینجا، نتایج مربوط به محاسبه بهره جداسازی مرکاپتان ها به عنوان محصولات سنگین در واحد صنعتی مربوطه بررسی شده‌اند. به عبارت دیگر، بهره جداسازی برای جریان خروجی مرکاپتان‌ها در مراحل گرمایش اول و دوم محاسبه شده‌اند. در واقع، جهت افزایش بهره جداسازی این محصولات سنگین اقدام به طراحی یک سیکل جدید برای سیستم PTSA گردیده است، به گونه‌ای که با همان زمان سیکل ۳۶hr منجر به حذف زمان یک ساعته مرحله رست (غیر فعال) در عملیات شده است و در عوض راندمان جداسازی بر حسب بهره (کمیت) حذف مرکاپتان‌ها افزایش یافته است. بر این اساس، سیکل طراحی شده جدید به صورت جدول ۶ می‌باشد.

همانطور که قبلاً هم اشاره گردید، عملکرد واحد صنعتی بر حسب درصد حذف مرکاپتان‌ها مطلوب است که در حقیقت این مورد در بحث شاخص کیفیت^۱ نهایی محصول مرکاپتان‌زدایی شده می‌گنجد. مورد دیگر که در سیستم‌ها جداسازی گازی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است مبحث کمیت^۲ یا بهره جداسازی^۳ می‌باشد. بهره جداسازی می‌تواند برای محصول سبک (جزء جذب نشده) و یا برای محصول سنگین (جزء جذب شده) محاسبه شود. براساس روابط موجود در منابع، بهره جداسازی برای یک سیستم جداسازی گازی در واحد زمان بصورت رابطه (۳۰) محاسبه می‌شود [۲۲].

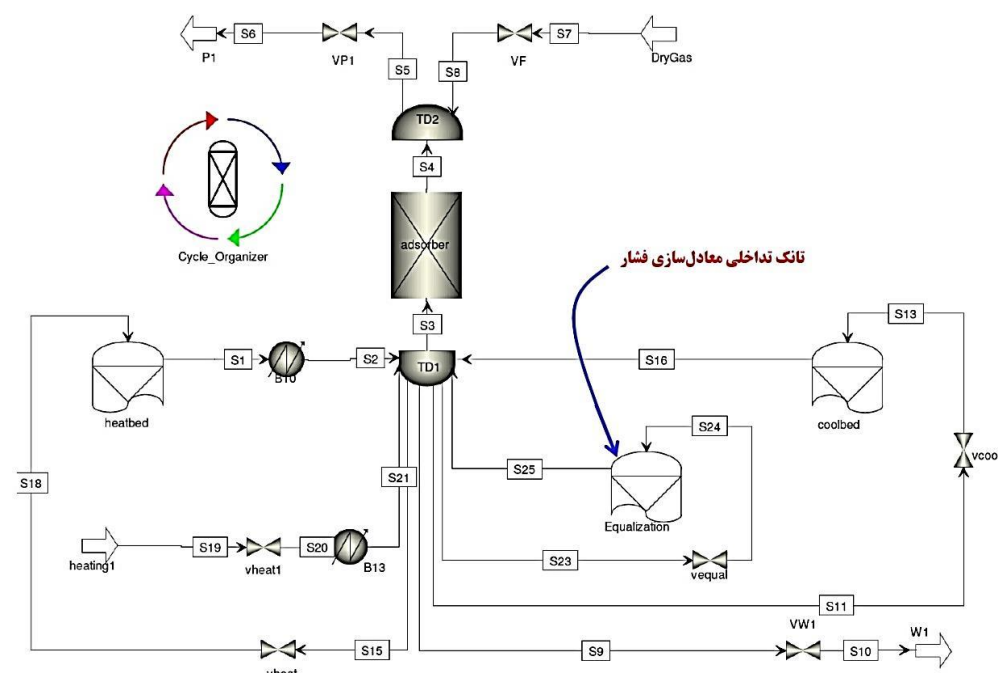
$$G = \frac{\text{mole of product output}}{\text{weight of used adsorbent}} \quad (30)$$

3. Separation Gain

1. Quantity
2. Quality

جدول (۶) جدول زمانی مراحل سیکل بهبود یافته جدید

| مرحله / شیرها | شیر ۱ | شیر ۲ | شیر ۳ | شیر ۴ | معادل سازی فشار | کاهش فشار | گرمایش اول | گرمایش دوم | سرمايش | معادل سازی | فشار زنی |
|---------------|-------|-------|-------|-------|-----------------|-----------|------------|------------|--------|------------|----------|
| VF | On | On | On | On | Off | Off | Off | Off | Off | Off | On |
| VP1 | Off | Off | Off | Off | Off | On | On | On | On | Off | Off |
| Vcool | Off | On | Off | Off | Off | Off | Off | Off | Off | Off | Off |
| Vheat | Off | Off | On | Off | Off | Off | Off | Off | Off | Off | Off |
| Vheat1 | Off | Off | Off | Off | Off | Off | On | Off | Off | Off | Off |
| VW1 | On | On | On | On | Off | Off | Off | Off | Off | Off | Off |
| Vequal | Off | Off | Off | Off | On | Off | Off | Off | Off | Off | Off |
| Time (min) | ۲۲۵ | ۲۴۰ | ۳۹۰ | ۲۲۵ | ۱۰ | ۲۰ | ۳۹۰ | ۳۹۰ | ۲۴۰ | ۱۰ | ۲۰ |



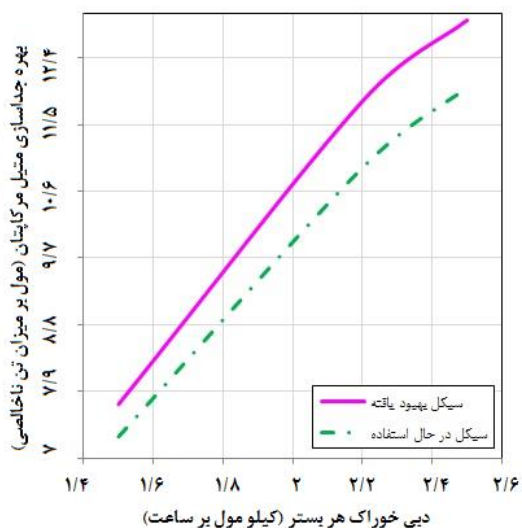
شکل (۱۰) PFD شبیه‌سازی واحد صنعتی براساس سیکل عملیاتی بهبود یافته

مرحله معادل سازی فشار خود به خود منجر به کاهش مصرف انرژی (توان مصرفی کمپرسور) می‌شود. از طرفی، بخاطر اینکه این گاز به مقدار کمی حاوی اجزاء سنگین (جذب شونده‌ها) است، از نقطه نظر کار جداسازی در مرحله جذب، ایجاد مرحله معادل سازی فشار مقرون به صرفه خواهد شد. در نهایت، PFD واحد صنعتی براساس سیکل جدید بصورت شکل ۱۰ شده است.

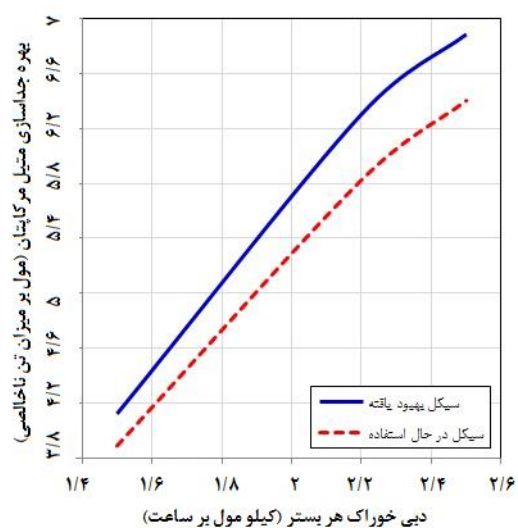
همانطور که در جدول ۶ دیده می‌شود، در طراحی سیکل جدید دو مرحله فرآیندی در عملیات جداسازی اضافه شده‌اند. یکی معادل سازی فشار برای کاهش فشار (معادل سازی فشار اول) و دیگری معادل سازی فشار برای افزایش فشار (معادل سازی فشار دوم). همچنین، مرحله رست از سیکل حذف شده است. به علت اینکه گاز با فشار بالا در انتهای مرحله جذب به منظور افزایش فشار بستری که در فشار پایین قرار دارد استفاده می‌گردد، لذا

در شکل‌های ۱۱ و ۱۲، بهره جداسازی مرکاپتان‌ها بر حسب تغییرات دبی خوراک ورودی به هر بستر آورده شده است. در این شکل‌ها، نتایج مربوط به سیکل در حال استفاده در واحد صنعتی موجود به همراه سیکل بهبود یافته نمایش داده شده است. بطور کل، با افزایش دبی خوراک ورودی به بسترهای جذب در حقیقت میزان ناخالصی‌های (مرکاپتان‌ها) ورودی به ستون‌های جذب نیز افزایش می‌یابد. بنابراین، بدیهی است که افزایش دبی خوراک ورودی منجر به افزایش میزان ناخالصی دفع شده در مراحل احیا (گرمایش دوم) شود. همچنانکه در شکل ۱۱ پیداست، کمترین مقدار بهره جداسازی متیل مرکاپتان برای سیکل فرآیندی واحد صنعتی برابر با $۳/۸۸ \text{ mol/Tonads}$ در دبی خوراک $۶/۴۰ \text{ mol/Tonads}$ و بیشترین مقدار آن برابر با $۶/۴۰ \text{ mol/Tonads}$ در دبی خوراک $۲/۵ \text{ kmol/hr}$ بوده است. این در شرایطی است که برای سیکل بهبود یافته با تغییر دبی خوراک ورودی از

شکل‌های ۱۱ و ۱۲، بهره جداسازی متیل مرکاپتان (مول بر میزان تن ناخالصی) در دبی خوراک هر بستر (کیلو مول بر ساعت) را نشان می‌دهد. در این شکل، دو خط نشان می‌دهد که بهره جداسازی متیل مرکاپتان (مول بر میزان تن ناخالصی) در دبی خوراک هر بستر (کیلو مول بر ساعت) چگونه با تغییر دبی خوراک ورودی به هر بستر تغییر می‌کند. خط آبی نشان‌دهنده سیکل بهبود یافته و خط قرمز نشان‌دهنده سیکل در حال استفاده است. هر دو خط نشان می‌دهند که بهره جداسازی متیل مرکاپتان (مول بر میزان تن ناخالصی) در دبی خوراک هر بستر (کیلو مول بر ساعت) با افزایش دبی خوراک ورودی به هر بستر افزایش می‌یابد. همچنین، بهره جداسازی متیل مرکاپتان (مول بر میزان تن ناخالصی) در دبی خوراک هر بستر (کیلو مول بر ساعت) در دبی خوراک هر بستر (کیلو مول بر ساعت) با افزایش دبی خوراک ورودی به هر بستر افزایش می‌یابد.



شکل (۱۲) بهره جداسازی اتیل مرکاپتان بر حسب دبی خوراک ورودی به هر به بستر

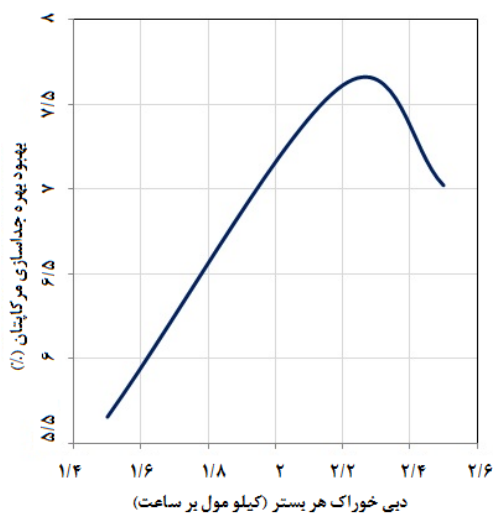


شکل (۱۱) بهره جداسازی متیل مرکاپتان بر حسب دبی خوراک ورودی به هر بستر

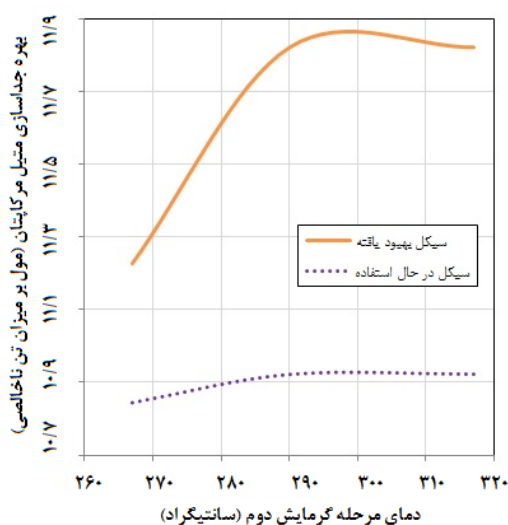
میزان بهبود عملکرد سیستم جداسازی مورد مطالعه را می‌توان در نتایج شکل ۱۳ مشاهده نمود. نتایج شبیه‌سازی‌ها نشان دادند که بهبود بهره جداسازی برای هر دو مرکاپتان‌ها مشابه به هم افزایش می‌یابد. شکل ۱۳ بهبود بهره جداسازی مرکاپتان‌ها بر حسب تغییرات دبی خوراک ورودی را نشان می‌دهد. همانطور که نمودار این شکل نشان می‌دهد، با افزایش دبی خوراک ورودی تا $۲/۳ \text{ kmol/hr}$ بهره جداسازی مرکاپتان‌ها در حال افزایش و از مقدار $۵/۶۵\%$ به $۷/۷\%$ میل می‌کند. افزایش بیشتر دبی خوراک ورودی منجر به کاهش بهره جداسازی شده است، چرا که ظرفیت جذب ستون‌های جاذب به اندازه‌ای نیست که قادر باشند در

دبی‌های بالاتر عملیات جداسازی را به خوبی انجام دهند. بنابراین، نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهند که با استفاده از سیکل فرآیندی طراحی شده‌ی جدید می‌توان دبی خوراک ورودی به هر بستر را تا $۲/۳ \text{ kmol/hr}$ (در مقایسه با $۲/۲ \text{ kmol/hr}$ فعلی) و در نتیجه بهره جداسازی مرکاپتان‌ها تا $۷/۷\%$ افزایش خواهند یافت.

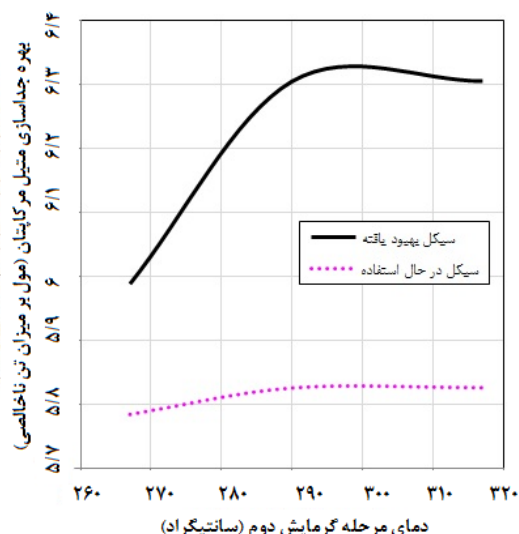
شبیه‌سازی و بهبود عملکرد واحد مرکاپتان‌زدایی شرکت گاز پارس جنوبی به کمک طراحی یک سیکل فرآیندی جدید



شکل (۱۳) میزان بهبود بهره جداسازی مرکاپتان‌ها بر حسب دبی خوراک ورودی و براساس سیکل عملیاتی بهبود یافته



شکل (۱۵) بهره جداسازی اتیل مرکاپتان بر حسب دمای مرحله گرمایش دوم



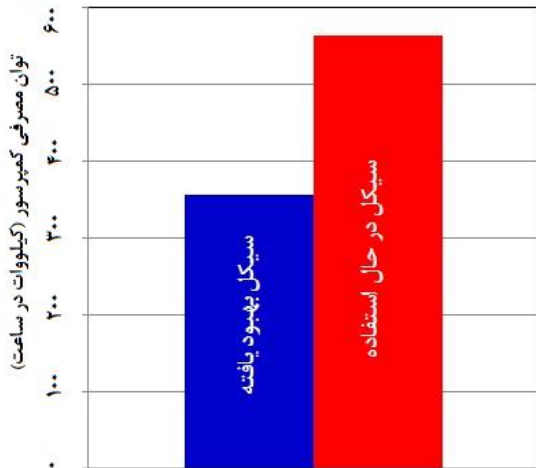
شکل (۱۴) بهره جداسازی متیل مرکاپتان بر حسب دمای مرحله گرمایش دوم

شکل‌های ۱۴ و ۱۵ به ترتیب نتایج مربوط به شبیه‌سازی بهره جداسازی متیل مرکاپتان و اتیل مرکاپتان بر حسب دمای مرحله گرمایش دوم را نشان می‌دهند. با تغییر دمای مرحله گرمایش دوم از 267°C به 317°C بهره جداسازی متیل مرکاپتان و اتیل مرکاپتان ابتدا افزایش می‌یابد و سپس به یک مقدار ثابت میل می‌کند. این در حالیست که در مورد سیکل فرآیندی بهبود یافته، افزایش دما تا 298°C منجر به افزایش بهره جداسازی شده است و سپس افزایش بیشتر دما تا 317°C منجر به کاهش بهره جداسازی خواهد شد.

براساس نتایج شکل‌های ۱۴ و ۱۵ می‌توان دریافت که با افزایش دمای مرحله گرمایش دوم از 267°C تا 317°C در شرایط استفاده از سیکل فرآیندی واحد صنعتی، بهره جداسازی متیل مرکاپتان از مقدار اولیه $5/78\text{mol/Tonads}$ به

بیشتر دما به $11/82\text{mol/Tonads}$ کاهش یافته است. شکل ۱۶ میزان بهبود بهره جداسازی مرکاپتان‌ها بر حسب دمای مرحله گرمایش دوم را نشان می‌دهد. همچنان که از شکل پیداست، افزایش دما تا 298°C منجر به افزایش بهره جداسازی

اولیه همان ۱۲/۸bar در نظر گرفته می‌شود. همچنین، فرض بر این است که بازده کمپرسور برابر با ۷۵٪ است. بر این اساس، نتایج مقایسه‌ای توان مصرفی کمپرسور برای سیکل فرآیندی مورد استفاده و سیکل بهبود یافته در شکل ۱۷ آورده شده است.



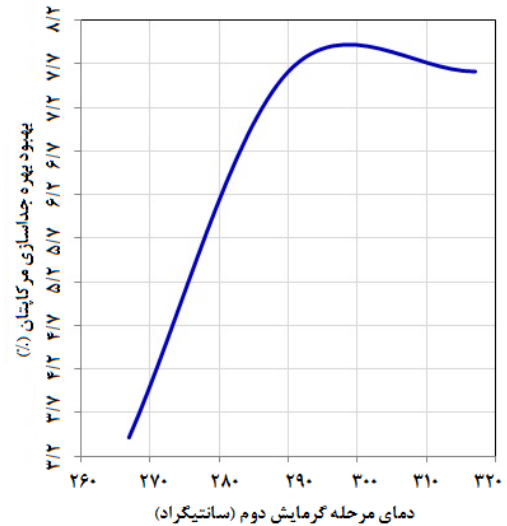
شکل (۱۷) توان مصرفی کمپرسور برای سیکل فرآیندی در حال استفاده و سیکل بهبود یافته

همانگونه که نتایج شبیه‌سازی در شکل ۱۷ نشان می‌دهند، با استفاده از سیکل بهبود یافته این امکان وجود دارد که توان مصرفی کمپرسور را از ۵۶۳/۵۲ kW.hr به ۳۵۵/۹۵ kW.hr کاهش داد که این خود می‌تواند در مبحث مصرف انرژی واحد صنعتی بطور قابل توجهی سودمند باشد.

۵- نتیجه‌گیری

در این مقاله، واحد عملیاتی PTSA مرکاپتان‌زدایی شرکت گاز پارس جنوبی توسط نرم‌افزار Aspen Adsorption شبیه سازی گردید. در راستای بهبود عملکرد واحد صنعتی اقدام به طراحی یک سیکل فرآیندی جدید نمودیم. در طراحی این سیکل فرآیندی زمان عملیات سیکلی مشابه با مدت زمان فعلی مورد استفاده در عملیات و برابر با ۳۶ hr در نظر گرفته و زمان مرحله رست حذف گردید. شبیه‌سازی‌ها به شکلی طرح‌ریزی شدند تا اثر متغیرهای عملیاتی نظیر دبی خوراک ورودی و دمای مرحله گرمایش دوم بر بهره‌دهی جداسازی مرکاپتان‌ها بررسی شود. نتایج شبیه‌سازی‌ها نشان دادند با استفاده از سیکل طراحی شده جدید، بهره‌دهی جداسازی برای هر دوی مرکاپتان‌ها مشابه به هم افزایش می‌یابد به گونه‌ای که می‌توان دبی خوراک ورودی به هر بستر را تا ۲/۳ kmol/hr افزایش داد (در مقایسه با ۲/۲ kmol/hr

مرکاپتان‌ها شده است. بر این اساس در دمای ۲۹۸°C (در مقایسه با دمای ۲۹۰°C فعلی مورد استفاده در واحد صنعتی) بهره‌دهی جداسازی مرکاپتان‌ها به مقدار ۷/۹٪ افزایش می‌یابد.



شکل (۱۶) میزان بهبود بهره‌دهی جداسازی مرکاپتان‌ها بر حسب دمای مرحله گرمایش دوم و براساس سیکل عملیاتی بهبود یافته

ایجاد مرحله معادل سازی فشار در سیکل فرآیندی اصولاً می‌بایست منجر به کاهش توان مصرفی^۱ کمپرسور شود. در شرایطی که فشرده سازی گاز بصورت یک فرآیند آدیاباتیک انجام می‌شود، توان مصرفی کمپرسور براساس یک تعریف مشخص می‌تواند به فرم معادله‌ی تئوری (۳۱) برآورد شود [۱۵]:

$$\dot{W} = \left(\frac{\gamma}{\gamma-1} \right) \cdot \left(\frac{\dot{m} \cdot R \cdot T}{\eta} \right) \cdot \left[\left(\frac{P_H}{P_L} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} - 1 \right] \quad (31)$$

در این معادله، \dot{W} توان مصرفی، γ نسبت ظرفیت‌های گرمایی گاز، \dot{m} دبی گاز، η بازده کمپرسور، P_H فشار نهایی فشرده‌سازی و P_L فشار اولیه می‌باشد.

در اینجا، توان مصرفی هم برای سیکل موجود و هم برای سیکل جدید محاسبه شده است. رابطه (۳۱)، تغییر توان مصرفی بین مراحل تخلیه (کاهش فشار) و فشار زنی (افزایش فشار) را نشان می‌دهد. در سیکل فرآیندی موجود، فشار نهایی فشرده سازی برابر با ۶۸bar و فشار اولیه برابر با ۱۲/۸bar می‌باشد و در سیکل بهبود یافته، فشار نهایی فشرده‌سازی برابر با ۴۰bar (فشار حاصل از پیش‌فشار زنی توسط مرحله معادل‌سازی) و فشار

1. Consumption power

شبیه‌سازی و بهبود عملکرد واحد مرکاپتان‌زدایی شرکت گاز پارس جنوبی به کمک طراحی یک سیکل فرآیندی جدید

دهد. با توجه به این نکته که کمپرسورها مخصوصاً نوع فشار بالای آن‌ها بیش‌ترین مصرف انرژی در صنایع نفت، گاز و پتروشیمی را دارا هستند لذا این سیکل پیشنهادی می‌تواند در مبحث مصرف انرژی واحد صنعتی به طور قابل توجهی سودمند باشد.

فعلی) و در نتیجه بهره جداسازی مرکاپتان‌ها تا ۷/۷٪ افزایش یابد. در شرایط استفاده از سیکل فرآیندی بهبود یافته، افزایش دمای مرحله گرمایش دوم به اندازه ۸°C منجر به افزایش بهره جداسازی مرکاپتان‌ها به اندازه ۷/۹٪ می‌گردد. بدین ترتیب ملاحظه می‌شود که تاثیر دما در افزایش بهره جداسازی بیشتر از تاثیر افزایش دبی ورودی است. همچنین، سیکل فرآیندی طراحی شده در این پژوهش قادر است توان مصرفی یک کمپرسور با بازده ۷۵٪ که در عملیات PTSA صنعتی استفاده می‌شود را به میزان ۳۶/۸۳٪ (برابر با ۲۰۷/۵۷kW.hr) کاهش

فهرست علائم

| علامت | نشانه |
|-----------|---------------------------------------------------------|
| A | سطح مقطع (m^2) |
| B_i | ضریب جذب برای جزء i (MPa^{-1}) |
| $B_{0,i}$ | ثابت ضریب جذب برای جزء i (MPa^{-1}) |
| $B_{0,j}$ | ثابت ضریب جذب برای دیگر اجزاء (MPa^{-1}) |
| C_i | غلظت جزء i (mol/m^3) |
| $C_{p,s}$ | ظرفیت حرارتی جاذب ($kJ/kg.k$) |
| $c_{p,g}$ | ظرفیت گرمایی گاز ($J/mol.k$) |
| D_L | ضریب پراکندگی جرمی محوری (m^2/s) |
| D_{in} | قطر درونی بستر (m) |
| G | بهره جداسازی ($mol/Tonads$) |
| h_i | میزان ضریب جابجایی انتقال حرارت ($W/m^2.k$) |
| K_L | ضریب پراکندگی حرارتی محوری ($J/m.k$) |
| L | طول لایه جاذب (m) |
| \dot{m} | دبی گاز اتلافی در مرحله کاهش فشار (kg/hr) |
| M_w | جرم مولکولی متوسط گاز ($kmol/kg$) |
| P_H | فشار نهایی فشرده سازی (bar) |
| P_L | فشار اولیه (bar) |
| P | فشار کل (bar) |
| q_i | مقدار غلظت جزء i در فاز جامد ($kmol/kg$) |
| $q_{m,i}$ | مقدار غلظت بیشینه جزء i در فاز جامد ($kmol/kg$) |
| q_{ace} | میزان انباشت انرژی در تمام فضاها بستر ($kJ/m^2.s$) |
| q_{gen} | میزان انرژی تولید شده توسط جذب سطحی ($kJ/m^2.s$) |
| q_w | میزان اتلاف انرژی از المان به محیط اطراف ($kJ/m^2.s$) |
| r_p | شعاع ذره (m) |
| T | دما ($^{\circ}C$) |
| t | زمان (s) |
| v_g | سرعت سطحی مخلوط گاز (m/s) |

| | |
|------------------------------------------|-----------|
| سرعت گاز (m/s) | u |
| توان مصرفی کمپرسور (kW.hr) | \dot{W} |
| جزء مولی جزء i در فاز گاز (mol/mol) | y_i |
| جزء مولی دیگر اجزاء در فاز گاز (mol/mol) | y_j |
| راستای حرکت گاز | z |
| ارتفاع المان (m) | dz |

حروف یونانی

| | |
|----------------------------------------|-----------------|
| بازده کمپرسور | η |
| ضریب معادله LDF برای جزء i ام | ω_i |
| ضریب تخلخل بستر | ε_b |
| دانسیته ذره جاذب (kg/m^3) | ρ_p |
| آنتالپی جذب (kJ/kmol) | ΔH_i |
| دانسیته گاز (kg/m^3) | ρ_g |
| دانسیته توده (kg/m^3) | ρ_B |
| ویسکوزیته مخلوط گاز (kg/ms) | μ_g |
| نسبت ظرفیت‌های گرمایی گاز | γ |
| ضریب شکل جاذب | ψ |

فهرست اختصارات

| | | |
|---------------------------------------|---------------------------------------------------|-------|
| شرایط پایای سیکلی | Cyclic Steady State | CSS |
| اتحادیه بین المللی شیمی محض و کاربردی | International Union of Pure and Applied Chemistry | IUPAC |
| نیرو محرکه خطی | Linear Driving Force | LDF |
| گاز طبیعی مایع | Liquid Natural Gas | LNG |
| معادله دیفرانسیل معمولی | Ordinary differential equation | ODE |
| نمودار فرایندی | Process Flow Diagram | PFD |
| جذب سطحی با تناوب فشار | Pressure Swing Adsorption | PSA |
| جذب سطحی با تناوب فشار- دما | Pressure-Temperature Swing Adsorption | PTSA |
| قسمت در میلیون | Part Per Million | PPM |
| معادله دیفرانسیل با مشتقات جزئی | Partial differential equation | PDE |
| جذب سطحی با تناوب دما | Temperature Swing Adsorption | TSA |
| جذب سطحی با تناوب خلأ | Vacuum Swing Adsorption | VSA |

مراجع

- [12] Y. Lyu, X. Liu, W. Liu, Y. Tian, Zh. Qin, (2020), "Adsorption/oxidation of ethyl mercaptan on Fe-N-modified active carbon catalyst", *Chemical Engineering Journal*, 393, 124680.
- [13] O. Taheri Qazvini, S. Fatemi, (2015) "Modeling and simulation pressure-temperature swing adsorption process to remove mercaptan from humid natural gas; a commercial case study", *Separation and Purification Technology*, 139, 88-103.
- [14] Aspen adsim, (2004) "Adsorption Reference Guide, Version number.
- [15] S. Jain, A.S. Moharir, P. Li, G. Wozny, (2003) "Heuristic design of pressure swing adsorption: a preliminary Study", *Sep. Purif. Tech.*, 33, 25-43.
- [16] A.I. Lacava, N.O. Lemcoff, (1996) "Single Pressure Swing Adsorption to Generate High Purity Nitrogen", *Gas. Sep. Purif.*, 10, 113-115.
- [17] S. Hayashi, M. Kawai, T. Kaneko, (1996) "Dynamics of High Purity Oxygen PSA", *Gas. Sep. Purif.*, 10, 19-23.
- [18] J.G. Jee, M.B. Kim, C.H. Lee, (2005) "Pressure Swing Adsorption to Purify Oxygen Using Carbon Molecular Sieve" *Chem. Eng. Sci.*, 60, 869-882.
- [19] B.T. Neu, J. Smolarek, A.C. Rosinski, M.W. Ackley, (2003) "Pressure Swing Adsorption Process for Co-Producing Nitrogen and Oxygen. U.S. Patent", 6,527-830.
- [20] D.M. Ruthven, S. Farooq, K. S. Knaebel, (1994) "Pressure Swing Adsorption", *New York: VCH Publishers, Inc.*
- [21] B. Crittenden, W.J. Thomas, (1998) "Adsorption Technology and Design", *Elsevier Science & Technology Books.*
- [22] R.T. Yang, (2003) "Adsorbents: Fundamentals and Applications", *New Jersey: John Wiley & Sons, Inc.*
- [1] A. De Angelis, (2012) "Natural gas removal of hydrogen sulphide and mercaptans", *Applied Catalysis B: Environmental*, 113, 37-42.
- [2] T.A. Verachtert, R.T. Cassidy, E.S. Holmes, (1990) "The UOP Merox Process for NGL Treating", *Processing 40th Laurance Reid Gas Conditioning Conference, University of Oklahoma.*
- [3] Industrial Documentation and Information Center, "Industrial Mercaptanization Unit", South Pars Gas Company.
- [4] P. Cruz, J.C. Stantos, F.D. Magalhaes, A. Mendes, (2003) "Cyclic adsorption separation processes: analysis strategy and optimization procedure", *Chemical Engineering Science*, 58, 3143-3158.
- [5] F. Berg, C. Pasel, T. Eckardt, D. Bathen, (2019) "Temperature Swing Adsorption in Natural Gas Processing: A Concise Overview", *Chem. Bio. Eng. Reviews*, 6, 59-71.
- [6] V. Chowanietz, C. Pasel, M. Luckas, T. Eckardt, D. Bathen, (2017) "Desorption of Mercaptans and Water from a Silica-Alumina Gel". *Ind. Eng. Chem. Res.*, 56, 614-621.
- [7] A. Taheri, E. Ganji Babakhani, J. Towfighi, (2017) "Methyl mercaptan removal from natural gas using MIL-53(Al)", *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 38, 272-282.
- [8] S. Fathi, G. Pourqazi, M. Safari, (2017) "Investigation and modeling of 13X-HP/Zn adsorbent performance in the removal of ethyl mercaptan from natural gas using Minitab software", *Fifth International Conference on Recent Innovations in Chemistry and Chemical Engineering, Tehran, Allameh Tabatabai University.*
- [9] M. Sheikh Alivand, (2017) "Design of pre-treatment unit of natural gas entering the LNG unit using adsorption method", *Master Thesis in Chemical Engineering, Faculty of Chemical and Petroleum Engineering, Sharif University of Technology.*
- [10] L. Zhu, X. Lv, Sh. Tong, T. Zhang, Y. Song, Y. Wang, Zh. Hao, Ch. Huang, D. Xia, (2019), "Modification of zeolite by metal and adsorption desulfurization of organic sulfide in natural gas", *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 69, 102941.
- [11] K. Motahari, M. Abdollahi-Moghaddam, A. Rashidi, (2020), "Mechanism study and determination kinetic of catalytic oxidation of mercaptans in Merox process", *South African Journal of Chemical Engineering*, 33, 116-124.

Simulation and Performance Improvement of Mercaptan Removal Unit of South Pars Gas Company by designing a new process cycle

Reza Seyed Abadi, Bahareh Bidar, Mohammad Reza Sardashti Birjandi, Farhad Shahraki *

Department of Chemical Engineering, Shahid NIKBakht Faculty of Engineering, Sistan and Baluchestan University, Zahedan, Iran

ABSTRACT

The purpose of the study is to present a new process cycle based on a pre-pressure stage to improve the performance of the mercaptan removal process from the natural gas in South Pars Gas Company. The separation process was simulated based on Pressure-temperature swing adsorption (PTSA) method using Aspen Adsorption software. Results showed that consumption power of compressor has been decreased by 36.83% using improved cycle. Moreover, the amount of separation capacity of mercaptans has been gained by increasing the inlet feed flow rate and the second heating stage temperature in both cycles. The maximum separation capacity was obtained by 7.7% at the feed flow rate of 2.3 kmol/hr and by 7.9% at the temperature of 298°C. The results demonstrated that the effect of temperature on separation capacity is greater than the inlet feed flow rate.

All right reserved.

ARTICLE INFO

Article history:

Received: November 4, 2020

Received in revised form: March 8, 2021

Accepted: May 16, 2021

Key words:

Mercaptan removal process
Pressure-temperature swing adsorption
Improved process cycle
Aspen Adsorption software

* Corresponding author
fshahraki@eng.usb.ac.ir