

شبیه‌سازی هیدرودینامیکی و انتقال حرارت راکتورهای تبدیل کاتالیستی با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی

پژوهش‌نفت

سال بیست و سوم
شماره ۷۳
صفحه ۴۴-۲۵، ۱۳۹۲
تاریخ دریافت مقاله: ۹۰/۴/۱۰
تاریخ پذیرش مقاله: ۹۱/۵/۱۷

رسول محمدی‌خواه^{*}، سرود زاهدی، مهدی احمدی مروست و حمید گنجی

پژوهشگاه صنعت نفت، پژوهشکده مهندسی توسعه فرآیند و فناوری تجهیزات، گروه

پژوهش توسعه و کنترل فرآیندها

Mohammadikhahr@ripi.ir

شرایط حرارتی سیستم بررسی شده‌اند. استفاده از عایقی با ضخامت دو برابر عایق کنونی با عایقی با ضریب هدایت حرارتی کمتر (0.6 W/m.K) تقریباً معادل هم می‌باشد که هر یک به نوبه خود اتلاف حرارتی از سیستم را کمتر می‌کند.

واژه‌های کلیدی: تبدیل کاتالیستی، هیدرودینامیک، توزیع زمان اقامت، انتقال حرارت، دینامیک سیالات محاسباتی

مقدمه

امروزه با پیشرفت‌های روزافزون بشر در زمینه‌های مختلف و از جمله تکنولوژی ماشینی، دو مبحث استفاده بهینه از انرژی و سوخت و تولید بیشتر سوخت‌های مورد استفاده، بیش از پیش نمود پیدا کرده است. سوخت اصلی مورد استفاده بشر در زندگی روزمره، بنزین می‌باشد که در برخی از واحدهای پالایشگاهی با استفاده از تکنولوژی واکنش‌های بازآرایی کاتالیستی تولید می‌شود. در واقع بیش از ۶۰٪ بنزین تولیدی در دنیا در واحدهای تبدیل کاتالیستی نفتا به وجود می‌آیند و از این نقطه نظر، شبیه‌سازی و بهینه‌سازی

چکیده

در این پژوهش شبیه‌سازی هیدرودینامیکی و انتقال حرارت راکتورهای واحد تبدیل کاتالیستی به کمک دینامیک سیالات محاسباتی انجام شده است. معادلات بقای جرم، ممتوم و انرژی به همراه معادلات اغتشاش به طور همزمان در المان‌های حجم محدود سیستم حل شده است. توزیع زمان اقامت سیال در این راکتورها با استفاده از تکنیک تزریق پله‌ای ردیاب در ورودی به دست آمده است. پارامتر پراکندگی جریان در هر سه راکتور تحت بررسی محاسبه و گزارش شده است. تصحیحات ساختاری قابل قبول در سیستم جهت رسیدن به شرایط جریانی مناسب و افزایش ظرفیت انجام شده است. مشخص شد که افزایش ظرفیت در ورودی و افزایش مقاومت‌های توزیع‌کننده‌های جریان، به بهبود یکنواختی جریان، کمک می‌کند. به منظور در نظر گرفتن گرمای تولید یا مصرف شده در ناحیه متخلخل حاوی کاتالیست که در آن واکنش‌های شیمیایی زیادی به وقوع می‌پیوندد، ترم‌های منابع چشمه یا چاه حرارتی در معادله انرژی جایگزین شده است. نتایج نشان می‌دهد که عمده افت دما در اولین راکتور اتفاق می‌افتد. در ادامه با تعویض شرایط عایق پوسته راکتورها،

این مطالعه با استفاده از دانش دینامیک سیالات محاسباتی حجم محدود و با به کار بردن تکنیک‌ها و فرض‌های ساده‌کننده نزدیک به واقعیت، سعی خواهد شد که دید تازه‌ای از انتقال حرارت و تبادل آن با محیط به دست آورده و از آن برای بهینه‌سازی حرارتی فرآیند استفاده کنیم تا بتوان عملکرد فرآیند را بهبود بخشیده و احتمالاً بازده و کیفیت بنزین تولیدی را بالاتر ببریم. در این مطالعه با فرض ناحیه متخلخل به عنوان بستر واکنش‌ها و با استفاده از تعریف منابع حرارتی به دلیل انجام واکنش‌های شیمیایی و همچنین منابع به علت وجود کوره بین راکتورها سعی خواهد شد تا حد امکان یک شبیه‌سازی معتبر از انتقال حرارت در سیستم به دست آورده شود.

روش کار

در این بخش چون هندسه کلی سیستم و راکتورها از تقارن محوری برخوردارند، فرم معادلات را در حالت دو بعدی با تقارن محوری بررسی و گزارش خواهیم کرد. لذا یک بعد محوری و یک بعد شعاعی خواهیم داشت. شکل دو بعدی معادله بقای جرم برای یک سیستم با تقارن محوری برای جریان‌های تراکم‌پذیر و تراکم‌ناپذیر به صورت زیر است:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x) + \frac{\partial}{\partial r}(\rho v_r) + \frac{\rho v_r}{r} = S_m \quad (1)$$

جرم اضافه شده به فاز پیوسته از طریق فاز ناپیوسته (S_m) در این مطالعه خاص برابر صفر است، زیرا جریان سیال در کل سیستم تک-فاز می‌باشد. قانون بقای ممتوم محوری و شعاعی نیز به ترتیب عبارتند از:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_x) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(r \rho v_x v_x) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v_r v_x) = - \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[r \mu \left(2 \frac{\partial v_x}{\partial x} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \right) \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial x} \right) \right] + F_x \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(r \rho v_x v_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v_r v_r) = - \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \mu \left(2 \frac{\partial v_r}{\partial r} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \right) \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[r \mu \left(\frac{\partial v_r}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial r} \right) \right] - 2 \mu \frac{v_r}{r^2} + \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \vec{v}) + \rho \frac{v_r^2}{r} + F_r \quad (3)$$

که در آن:

$$\nabla \cdot \vec{v} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_r}{r} \quad (4)$$

ترم F در طرف دوم این معادلات بیان‌گر چشمه یا چاه ممتوم القایی به وسیله نیروهای بدنه (مثلاً شتاب جاذبه)

نرم‌افزاری چنین واحدهایی همراه با معتبرسازی نتایج در مقیاس پنج و پایلوت از اهمیت خاصی برخوردار است. واکنش‌های تبدیل کاتالیستی نفتا متعدد و پیچیده هستند و با توجه به وجود برش‌های فراوان (حدود ۳۰۰۰ برش) هیدروکربوری در خوراک، شبیه‌سازی سینتیکی دقیق این واحدها عملی به نظر نمی‌رسد، اگر چه مطالعاتی با فرضیات بسیار ساده و محدودکننده که هریک بر روی فرآیند اثرگذار هستند، انجام شده است [۱-۵]. مهم‌ترین عامل مؤثر در مقدار تبدیل خوراک به بنزین با عدد اکتان مناسب، پارامتر دما است. البته الگوی جریانی و پراکندگی محوری یا شعاعی جریان نیز از فاکتورهای مهم در این زمینه به شمار می‌رود. لذا شبیه‌سازی حرارتی این فرآیند و بهینه‌سازی مصرف انرژی آن لازم و ضروری به نظر می‌رسد. زیرا از یک طرف با کاهش مصرف انرژی، فرایند مقرون به صرفه‌تر خواهد شد و از طرف دیگر کاهش هدر رفت گرما در سیستم، افت دمای راکتورها را کمتر و در نتیجه درصد تبدیل را بیشتر کرده و کیفیت بنزین تولیدی را بهتر و مناسب‌تر خواهد کرد [۵].

با پیشرفت دانش نرم‌افزاری و سخت‌افزاری در قرن اخیر، امکان حل عددی معادلات جریانی، حرارتی و جرمی با استفاده از کامپیوترهای پرسرعت به وجود آمده است. به عنوان مثال، روش‌های حجم محدود، برای حل معادلات جریانی بسیار مناسب می‌باشند. استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی^۱ در قالب حجم محدود ابزاری ارزشمند و تقریباً ارزان جهت شبیه‌سازی فرآیندهای مختلف به حساب می‌آید، با این حال هنوز در این زمینه محدودیت‌هایی نظیر نیاز به منابع محاسباتی زیاد، پردازنده‌های قوی، عدم حذف خطاهای حل عددی، وابستگی نتایج به نیروی انسانی و مدل کردن تنش‌های رینولدز و معادلات اغتشاش، وجود دارد. شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی فرآیند تبدیل کاتالیستی تا کنون انجام نشده است و در این خصوص مطالعات موردی محدودی، تنها هیدرودینامیک فرآیند را بررسی کرده‌اند [۶ و ۷]. در هیچ یک از این مطالعات، نتیجه‌گیری بر مبنای توزیع زمان اقامت، شبیه‌سازی حرارتی و انتقال جرم اجزا انجام نشده است. بنابراین، شبیه‌سازی هیدرودینامیکی و حرارتی سیستم ارزشمند خواهد بود. در

1. Computational Fluid Dynamics (CFD)

می‌شود [۱۳]:

$$k_{eff} = \gamma k_f + (1 - \gamma) k_s \quad (9)$$

برای شبیه‌سازی حرارتی سیستم، منابع حرارتی واکنشی همگی در داخل بست‌های کاتالستی فعال می‌شوند، زیرا واکنش‌ها در این قسمت‌ها اتفاق می‌افتد. در این خصوص استفاده از هندسه هر سه راکتور با هم از نظر شبیه‌سازی حرارتی مزیتی بزرگ به حساب می‌آید. زیرا علاوه بر شبیه‌سازی حرارتی سیستم، می‌توان بار حرارتی مورد نیاز کوره و دیگر پارامترهای آن را نیز شبیه‌سازی کرد. با تغییر منابع حرارتی کوره می‌توان دماهای ورودی به راکتورها را تغییر داد و از این طریق وارد فاز جدیدی از شبیه‌سازی‌ها شد. با این هندسه علاوه بر شبیه‌سازی انتقال حرارت در راکتورها به تنهایی، می‌توان کوره را نیز با فرض اینکه ناحیه اتصال بین راکتورها را تشکیل داده است، شبیه‌سازی کرد. در واقع لوله‌های رابط بین راکتورها به عنوان کوره فرض شده و منابع حرارتی مناسب در این قسمت‌ها قرار داده خواهد شد. در ابتدا باید منابع حرارتی محاسبه شوند. برای این کار دو روش وجود دارد. در روش اول لازم است با توجه به درصد تبدیل موجود از داده‌های تجربی، مقدار پیشرفت واکنش‌ها مشخص شود و نهایتاً با توجه به میزان گرمای تولید یا مصرف شده از هر واکنش، ترم‌های منابع حرارتی محاسبه شوند. در روش دوم از طریق موازنه انرژی بین نواحی قبل و بعد بست‌ها یا کوره‌ها، مقادیر منابع انرژی تعیین می‌شود. به دلیل تغییر درصد تبدیل به مرور زمان ناشی از اعمال تغییرات در شرایط عملیاتی، در این مطالعه راه دوم را انتخاب کرده‌ایم. به هر حال اگر محاسبات معتبر باشد، در صورت استفاده از هر دو روش، باید به نتایج مشابه برسیم. در روش دوم به کمک انجام محاسبات موازنه آنتالپی (یا موازنه حرارتی) در حالت طراحی (مطابق با ظرفیت اسمی)، مقادیر حرارت اضافه شده یا کاسته شده از سیستم به واسطه گرمای واکنش‌ها و شار حرارتی در کوره‌ها محاسبه و استفاده می‌شوند. در این روش نیز فرضیات ساده‌کننده‌ای به کار می‌رود. مثلاً انتقال حرارت از دیواره‌ها به محیط نادیده پنداشته می‌شود و در واقع سیستم، آدیاباتیک فرض می‌شود. در ادامه خلاصه این محاسبات برای راکتورها و کوره‌های فرضی آورده

یا محیط متخلخل است که معمولاً با معادله ۵ در محیط متخلخل جایگزین می‌شود.

$$F_i = -\left(\frac{\mu}{\alpha} v_i + c_2 \frac{1}{2} \rho |v| v_i\right) \quad (5)$$

بنابراین معادلات حاکم اصلی روابط ۱، ۲ و ۳ هستند که باید همزمان با یک یا چند معادله اغتشاش حل شوند. کلیه معادلات فوق را می‌توان در مرجع [۸] جستجو نمود. طبق شبیه‌سازی‌هایی که قبلاً انجام گرفته است مدل دو پارامتری k-ε استاندارد همراه با توابع دیواره استاندارد در حالت y⁺ بین ۳۰ تا ۳۰۰ و با فرض زبری دیواره ۰/۰۰۰۰۰۱ m برای این سیستم خاص معتبر است و می‌توان از عدم وجود جریان‌های چرخشی در سیستم که نیازمند شبیه‌سازی سه بعدی سیستم است، اطمینان حاصل کرد [۶، ۷ و ۹-۱۱]. در تمامی این مراجع نتایج سه بعدی و دو بعدی مشابه یکدیگر گزارش شده‌اند. زیرا سیستم مورد نظر از تقارن محوری بسیار بالایی برخوردار است. به هر حال شکل استاندارد معادلات انتقال برای k و ε به صورت زیر است [۱۲]:

$$\frac{\partial(\rho v_i k)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_T}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + G - \rho \epsilon \quad (6)$$

$$\frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_i \epsilon)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_T}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right) + \frac{\epsilon}{k} (C_1 G - C_2 \rho \epsilon) \quad (7)$$

G را می‌توان توسط مدل‌های خاصی محاسبه کرد [۸]. μ_T بیانگر ویسکوزیته اغتشاش است و معمولاً با توان دوم k رابطه مستقیم دارد. این معادلات انتقال، ۴ پارامتر تجربی $(\sigma_k, \sigma_\epsilon, C_1, C_2)$ دارد که مقادیر آنها به کمک آزمایشات تجربی به دست می‌آید [۱۳]. با استفاده از قابلیت‌های دانش دینامیک سیالات محاسباتی، به راحتی می‌توان این معادلات را در حوزه عملکرد سیال به صورت عددی حل کرده و نتایج را به دست آورد. تقریب محیط متخلخل علاوه بر این که ترم چاه ممتوم معادله ۵ را وارد معادلات بقاء ممتوم می‌کند، تخلخل مورد نظر را در تمامی متغیرهای اسکالر حاضر در ترم‌های معادلات انتقال ضرب خواهد کرد. به عنوان مثال معادله بقای انرژی در یک سیستم شامل محیط متخلخل به صورت زیر است [۱۳]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\gamma \rho_f E_f + (1 - \gamma) \rho_s E_s) + \nabla \cdot (\vec{v} (\rho_f E_f + p)) = \nabla \cdot [k_{eff} \nabla T - (\sum_i h_{i,j} i_j) + (\vec{\tau} \cdot \vec{v})] + S_f^h \quad (8)$$

در محیط‌های متخلخل توسط مدل محاسباتی، به عنوان متوسط حجمی هدایت حرارتی سیال و جامد محاسبه

نمودار C_{step} بر حسب زمان، منحنی F نام دارد که معمولاً از آن جهت یافتن منحنی توزیع زمان اقامت استفاده می‌شود. به طور خلاصه با مشتق‌گیری از نمودار F بر حسب زمان می‌توان به راحتی به منحنی E دست یافت.

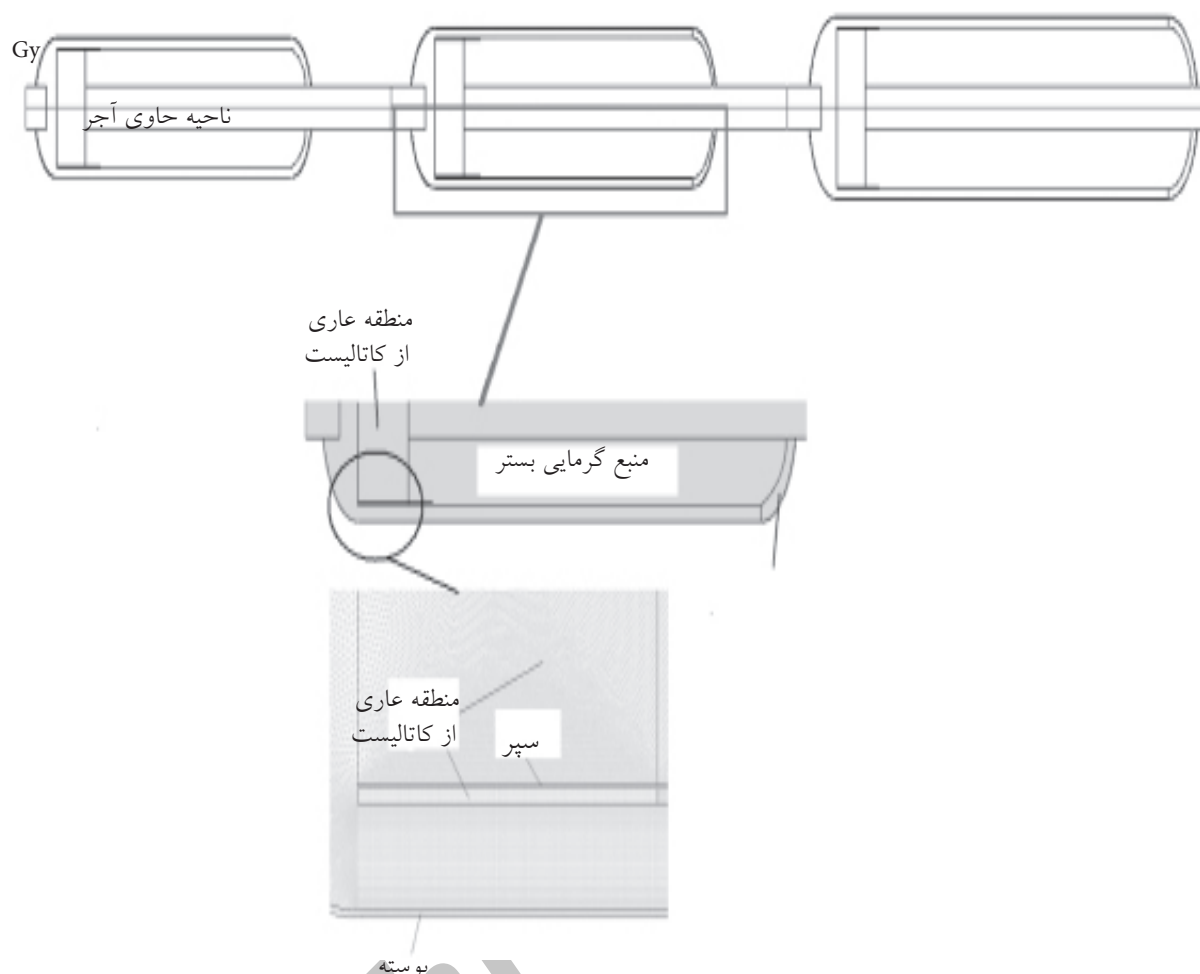
شبکه‌بندی

در خصوص شبیه‌سازی حرارتی سیستم، برای تمامی رآکتورها ضخامت پوسته مدنظر بوده است و مطابق با اطلاعات دریافت شده از پالایشگاه تهران، عایقی از جنس آزبست و به ضخامت ۵ cm به دور هر سه رآکتور بسته شده است [۱۵]. ضخامت پوسته رآکتورها به طور مساوی و برابر ۸۸ mm فرض شده است. شکل ۱ شبکه‌بندی دو بعدی با تقارن محوری مورد استفاده در اجزای حرارتی را نشان می‌دهد. برای شبیه‌سازی حرارتی تمام مناطقی که سیال از آنها عبور نمی‌کند را نیز باید شبکه‌بندی کنیم (مثلاً پوسته رآکتورها، منطقه خالی از کاتالیست و منطقه حاوی آجرهای نسوز). در شبیه‌سازی حرارتی، رژیم انتقال حرارت از نوع هدایت حرارتی در این مناطق حاکم بوده و بر روی نتایج اثرگذار خواهد بود. لذا همان‌گونه که شکل ۱ نشان می‌دهد، قسمت بدون کاتالیست و قسمت حاوی آجر انتهای بسترها نیز شبکه‌بندی شده‌اند. ضمن اینکه قسمت پوسته رآکتورها نیز باید شبکه‌بندی شوند. در شکل ۱ نواحی مختلف رآکتور اول با ذکر نام نشان داده شده‌اند. در قسمت پوسته رآکتورها، چندین لایه شبکه‌بندی مورد استفاده قرار گرفت تا از وجود گرادیان‌های دمایی در پوسته (در صورت وجود) اطلاع پیدا کنیم. جنس بدنه رآکتور از فولاد استیل با پوشش کروم است که به اصطلاح ($\text{Chrom 1 } 1/4$) نامیده می‌شود. جنس کلیه آلیاژهای داخلی از فولاد کربن استیل فرض شده و از خواص حرارتی این ماده در شبیه‌سازی‌ها استفاده شده است. شکل ۱ حاوی ۳۱۸۴۵۸۵ مش با در نظر گرفتن مش پوسته رآکتورها است. ناحیه پر شده از آجرهای نسوز با نوعی سیمان به نام گرین کاست^۲ ۹۴ پر شده است.

شده است. لازم به ذکر است که برای لحاظ نمودن گرمایش سیال در کوره‌های فرضی نیز می‌توان از دو روش استفاده کرد: ۱- فرض شار حرارتی ثابت بر روی دیواره‌های کوره و ۲- فرض ایجاد منابع حجمی حرارتی در کوره‌ها. مورد اول شرایط مورد انتظار را برآورده نخواهد کرد و ما ناگزیریم که شبیه گرمای واکنشی، برای کوره‌ها نیز منابع حجمی حرارتی را از نوع چشمه در نظر بگیریم.

مفهوم توزیع زمان اقامت یکی از راه‌های تئوری جهت تخمین مقدار انحراف سیستم از حالت ایده‌آل و مقدار پراکندگی جریان از مدل کاملاً پیستونی به شمار می‌رود. در حقیقت المان‌های مختلف سیال از مسیرهای مختلفی در رآکتور عبور می‌کنند. در نتیجه زمان‌های متفاوتی را در حال عبور از رآکتور طی می‌نمایند. به مجموع توزیع این زمان‌ها برای جریان سیال خروجی از رآکتور، توزیع سن خروجی E یا همان توزیع زمان اقامت^۱ RTD گفته می‌شود. کلیه مباحث و فرمول‌های مربوط به این مبحث در مرجع [۱۴] ارائه شده است. در این پژوهش برای مطالعه پراکندگی جریان، فقط از روش تزریق ردیاب پله‌ای به صورت فرضی استفاده خواهیم کرد. به این صورت که پس از انجام شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی و پایدار شدن جریان در رآکتور یا مخزن مورد نظر، سیال ردیابی با خواص هیدرودینامیکی کاملاً یکسان در ورودی جریان به صورت پله‌ای تزریق می‌کنیم و غلظت آن را در خروجی سیستم ثبت می‌نماییم. باید دقت شود که از زمان تزریق ردیاب، محاسبات به صورت ناپایدار انجام شود تا بتوان اثرات عبور ردیاب را مشاهده کرد. جریانی با دبی حجمی $v \text{ (m}^3/\text{s)}$ را در ورودی رآکتوری به حجم V در نظر می‌گیریم. در زمان فرضی $t=0$ ردیابی را با غلظت C_{max} در ورودی تزریق می‌کنیم و غلظت ردیاب را در خروجی اندازه و ثبت می‌نماییم و منحنی C_{step} را در خروجی بر حسب زمان t تا زمان‌های نسبتاً طولانی رسم می‌کنیم. این عمل را تا زمانی ادامه می‌دهیم که غلظت ردیاب در خروجی به ۹۹/۹۹٪ مقدار ورودی آن برسد. منحنی به دست آمده اصطلاحاً S شکل است و به طور مجانبی به مقدار غلظت ورودی ردیاب نزدیک می‌شود. این منحنی دارای نقطه عطفی در زمان متوسط اقامت سیال ($\bar{t}$) می‌باشد. شکل بدون بعد

1. Residence Time Distribution
2. Greencast 94



شکل ۱- شبکه‌بندی مورد استفاده در شبیه‌سازی حرارتی برای سیستم دو بعدی با تقارن محوری، نواحی مختلف رآکتور و ناحیه انجام واکنش (رآکتور دوم)، پوسته رآکتور که حاوی سه لایه مش است به همراه ناحیه خالی از کاتالیست و سپر

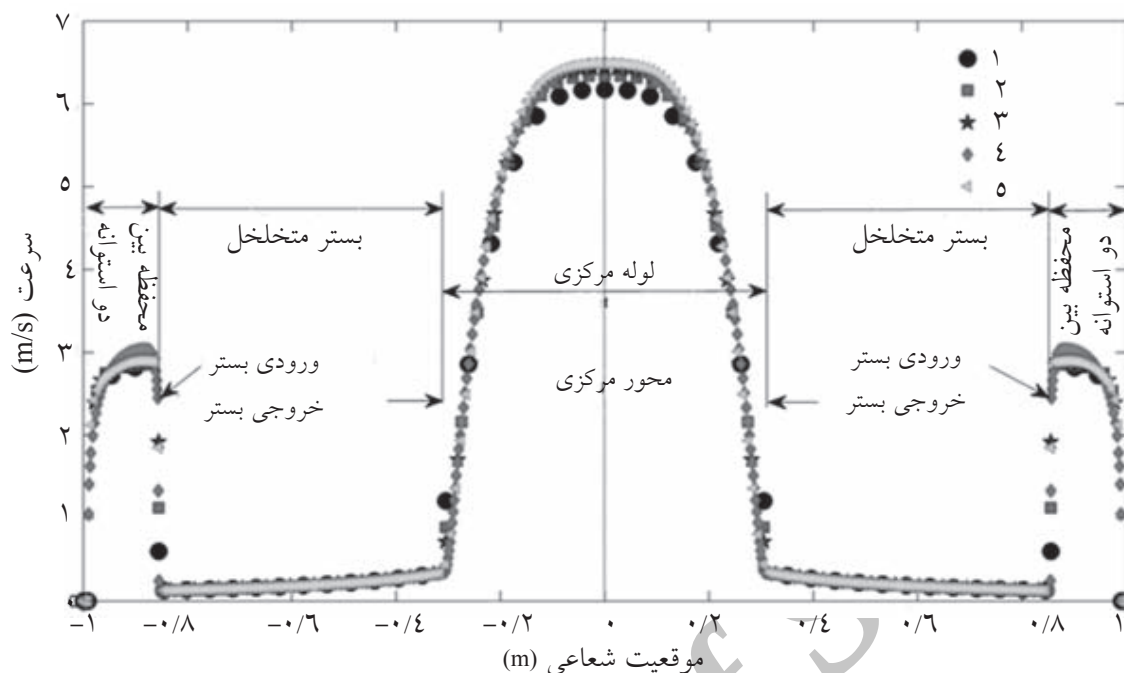
شبکه‌بندی متفاوت بررسی شده است. شکل ۲ نشان می‌دهد که در صورت انتخاب مش نوع ۴، پروفایل سرعت بر حسب شعاع از نوع مش‌بندی مستقل می‌شود. در نتیجه می‌توان مطمئن بود که اندازه مش در نتایج بی‌تأثیر است.

خواص حرارتی

خواص حرارتی سیالات و جامدات موجود در سیستم از منابع و مراجع معتبر استخراج شده‌اند [۱۶ و ۱۷]. خواص حرارتی سیال عملیاتی در متوسط فشار و دمای عملیاتی ثابت انتخاب شده است. مقادیر متوسط ظرفیت گرمایی ویژه و ضریب هدایت حرارتی هیدروژن با توجه به مقدار حجمی غالبی که دارد (بیش از ۷۰٪)، به ترتیب kJ/kg.K و 12425 و 0.35542 W/m.K در نظر گرفته شده‌اند [۱۸].

این ناحیه از رآکتور یک ناحیه مرده به شمار می‌رود که سیال اجازه عبور از آن را ندارد. از ۳ لایه مش جهت ضبط گرادیان دمایی در پوسته استفاده شده است. شبکه‌بندی پوسته و ناحیه حاوی سیمان بر مبنای سازمان یافته و نواحی مرکزی خالی از کاتالیست بر مبنای غیر سازمان یافته انجام گرفته است. سپر موجود داخلی نیز به صورت تک لایه شبکه‌بندی شده است. زیرا وجود گرادیان دمایی داخل آن با توجه به ضخامت ناچیز و ضریب هدایت حرارتی بالای آن بعید به نظر می‌رسد. همچنین در نزدیکی دیواره‌ها از مش لایه مرزی چگال استفاده شده است تا بتوان اثرات لایه مرزی و اثرات دیواره را بر روی توده سیال لحاظ نمود.

برای از بین بردن اثرات اندازه مش بر روی نتایج، چندین



شکل ۲- نمودار سرعت بر حسب شعاع در رآکتور اول برای شبکه‌بندی‌های مختلف (شبکه‌بندی نوع ۴ حاوی ۳۱۸۵۴۸۵ تعداد مش می‌باشد)

این کوره، سیال را از یک دمای مشخص به دمای مشخص دیگری می‌رساند. لذا اصل شبیه‌سازی نیز بر این مبنا استوار شده است. درجه حرارت محیط پیرامون رآکتورها 77°F مطابق با دمای استاندارد محیط و ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی محیط $10 \text{ W/m}^2\text{K}$ انتخاب شده‌اند. این ضریب در حالت باد شدید ممکن است تا ۱۰ برابر افزایش یابد.

محاسبه منابع حرارتی واکنشی

همان‌گونه که قبلاً ذکر شد، منابع انرژی واکنشی که در هر سه رآکتور به صورت چاه انرژی لحاظ می‌شود، بر اساس موازنه انرژی محاسبه می‌شوند نه به کمک گرمای واکنش و فرض یک درصد تبدیل خاص. این روش در صورت تغییر درصد تبدیل باعث می‌شود که محاسبات از اعتبار بیشتری برخوردار باشند. محاسبات منابع حرارتی واکنشی در بسترهای کاتالیستی برای رآکتورهای اول، دوم و سوم انجام شده است که نتایج آن به اختصار در جدول ۲ ارائه شده است.

محاسبه منبع حرارتی کوره

دو کوره فرضی در محل لوله‌های رابط رآکتور اول به دوم و رآکتور دوم به سوم وظیفه گرم کردن سیال تا دمای مطلوب را برعهده دارند (شکل ۳).

جنس کاتالیست بسترها R62 پلاتین-رنیوم بر پایه آلومینا با سطح فعال حدود $200 \text{ m}^2/\text{gr}$ است. ظرفیت گرمایی ویژه و ضریب هدایت حرارتی آلومینا به ترتیب برابر 765 J/kg.K و 13 W/m.K و دانسیته آن 3975 kg/m^3 است [۱۹]. عایقی که به دور پوسته رآکتور قرار دارد، طبق آنچه گفته شد از جنس آزیست با خواص ظرفیت گرمایی ویژه و ضریب هدایت حرارتی به ترتیب 1046 J/kg.K و 0.2336 W/m.K و دانسیته آن 5767 kg/m^3 است [۱۹]. خواص سیمان استفاده شده که خود نوعی عایق حرارتی به شمار می‌آید، از مراجع مربوطه استخراج شده است [۱۶]. ظرفیت گرمایی ویژه و ضریب هدایت حرارتی این ماده به ترتیب برابر است 765 J/kg.K و 1.85 W/m.K . دانسیته این ماده نیز برابر 2500 kg/m^3 گزارش شده است. تخلخل بسترهای کاتالیستی نیز ثابت و برابر 0.37 انتخاب شده است.

شرایط عملیاتی

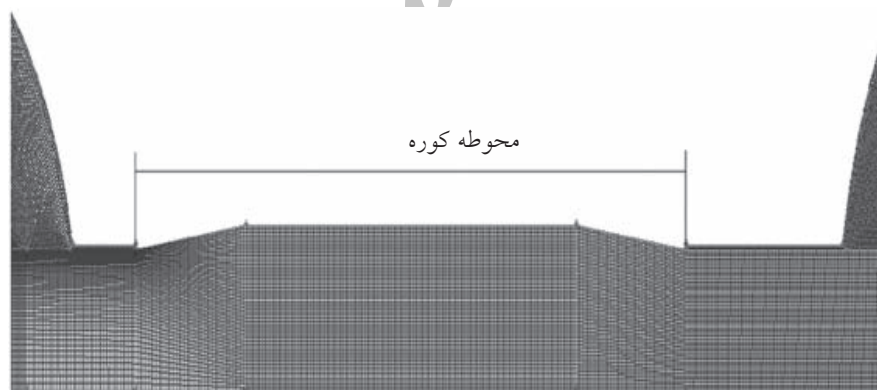
در جدول ۱ شرایط عملیاتی هیدرودینامیکی و حرارتی در حالت ظرفیت اسمی به طور خلاصه ذکر شده است. جزئیات شرایط حرارتی کوره‌ها نامعلوم است. تنها اطلاعاتی که در این خصوص وجود دارد، این است که

جدول ۱- شرایط عملیاتی طراحی رآکتورهای پالایشگاه تهران [۱۵]

شرایط عملیاتی	رآکتور اول	رآکتور دوم	رآکتور سوم
فشار ورودی (Psig)	۴۴۵	۴۱۵	۳۸۸
فشار خروجی (Psig)	۴۳۲	۴۰۱	۳۷۸
دمای ورودی (°F)	۱۰۰۰	۱۰۰۰	۱۰۰۰
دمای خروجی (°F)	۹۱۱	۹۸۱	۹۹۸
سرعت خوراک ورودی (°F)	۱۵/۸۴۸	نامعلوم	نامعلوم

جدول ۲- منابع حرارتی استفاده شده در محاسبات

شرح منبع حرارتی و نوع آن	نرخ حجمی تولید (W/m^3)	حجم ناحیه مشمول (m^3)
بستر اول (واکنشی)	-۵۵۶۰۸۰	۱۰/۰۶۸۱۹۹
بستر دوم (واکنشی)	-۷۵۸۰۱	۱۶/۲۰۹۴۱۳
بستر سوم (واکنشی)	-۷۲۸۰/۳	۲۹/۱۲۲۱۲۷
کوره اول (فیزیکی)	۸۸۴۸۳۰۰	۰/۶۳۲۷۴۵۷۱
کوره دوم (فیزیکی)	۲۳۷۳۴۰۰	۰/۵۱۷۶۹۲۴۴



شکل ۳- کوره فرضی بین رآکتور اول و دوم

سوم افزایش می‌یابد.

در واقع بر اساس تجربه مشاهده شده که نرخ واکنش‌های گرماگیر از رآکتور اول به سوم کاهش یافته و برعکس شدت واکنش‌های گرمازا از رآکتور اول به سوم افزایش می‌یابد [۱۵، ۲۰ و ۲۱]. همچنین نرخ حرارت مورد نیاز در کوره دوم جهت جبران دمای از دست رفته تقریباً ۰/۲۵ اولین کوره است. کلیه منابع حرارتی گزارش شده در معادله انرژی جای‌گذاری شده و نقش یک چشمه یا چاه حرارتی را در ناحیه مربوطه ایفا می‌کنند.

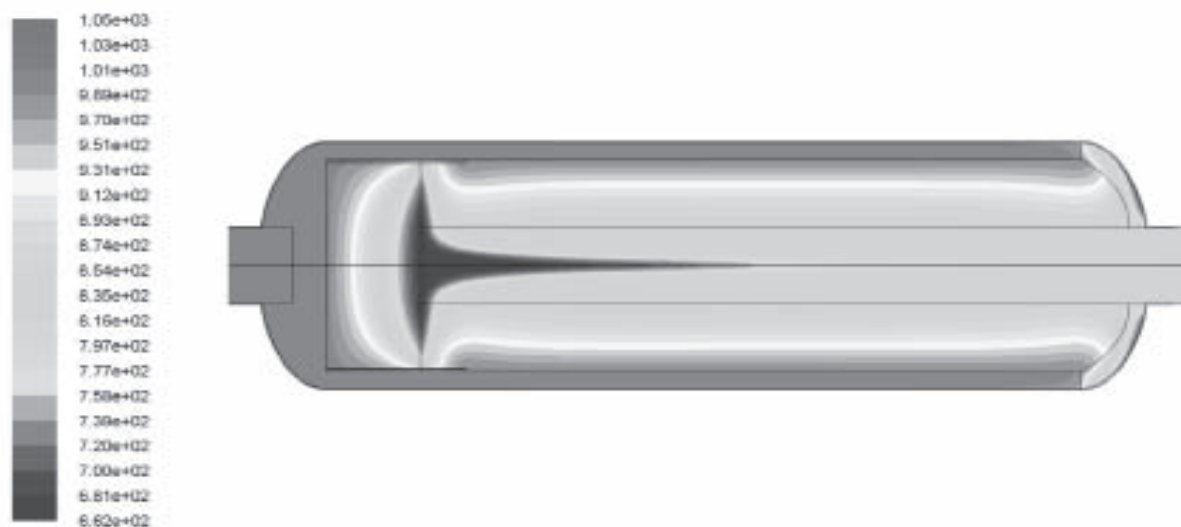
طبق یک اجرای آزمایشی انجام شده، این نتیجه به دست آمد که منابع گرمایی لزوماً باید از نوع چشمه و به صورت حجمی تعریف شوند و استفاده از شار حرارتی سطحی برای گرم کردن سیال به دلیل سرعت بالای سیال، اثر بخش نمی‌باشد.

جدول ۲ خلاصه محاسبات منابع حرارتی حجمی کوره‌ها را گزارش کرده است. مطابق جدول ۲، نرخ حجمی مصرف حرارت از بستر اول به بستر سوم کاهش قابل ملاحظه‌ای داشته است، زیرا شدت واکنش‌های گرمازا از بستر اول به

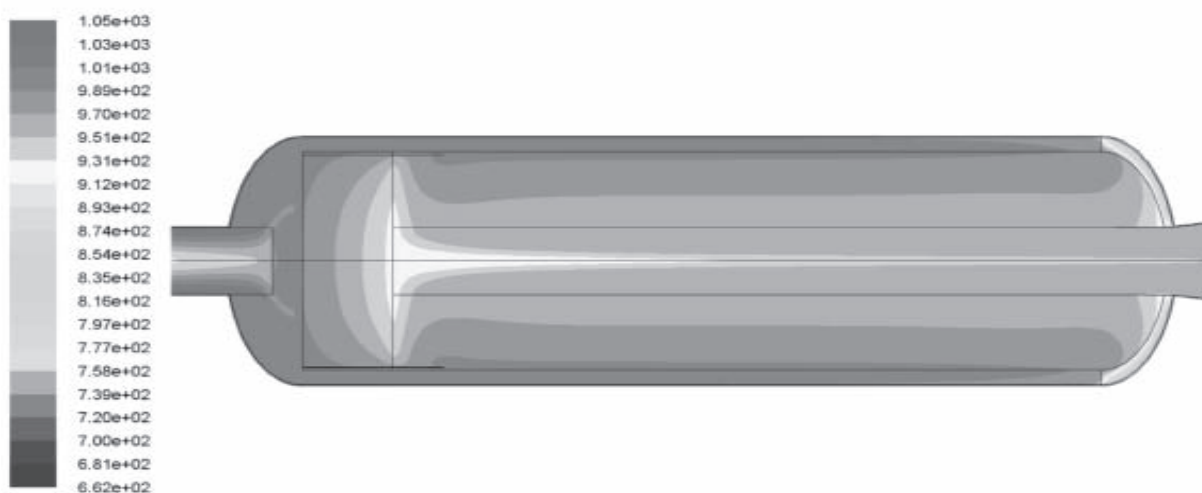
نتایج و بحث

اول بیشتر از بستر دوم و سوم است. این نتیجه مطابق با مقادیر به دست آمده جدول ۲ است. افت دمایی بستر دوم نیز از بستر سوم بیشتر است. در ورودی تمامی رآکتورها باید دمای یکسانی برابر با 1000°F به دست آید. نواحی خالی از کاتالیست کمترین دما را در سیستم دارد. این نواحی، حاوی گلوله‌های سرامیکی خنثی است که نقش یک عایق حرارتی بسیار کارآمد را بازی می‌کند و عمل درزبندی و جلوگیری از میان بر زدن سیال را بر عهده دارد. بنابراین، حرارت فقط از طریق مکانیزم نفوذ به این مناطق منتقل می‌شود. کانتورهای آنتالپی در رآکتور اول در شکل ۷ نشان داده شده است. آنتالپی همیشه به همراه جریان معنا و مفهوم خود را بیان می‌کند، زیرا دبی جرمی بخش جدایی‌ناپذیر آن است.

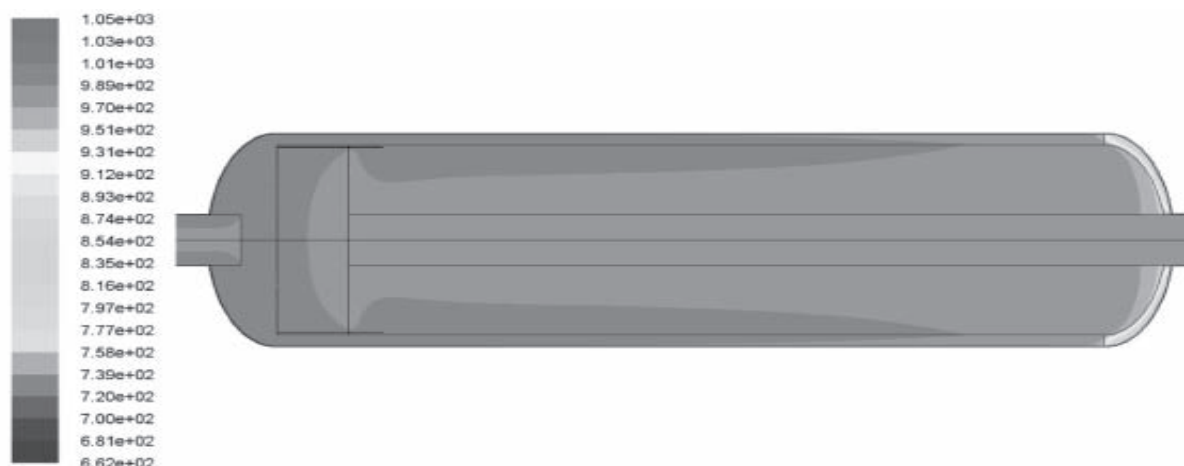
در این قسمت سیستم اصلی در حالت طراحی (تحت ظرفیت اسمی) که بسیار نزدیک به شرایط عملیاتی است، شبیه‌سازی شده است. کانتورهای دمایی در رآکتورها در شکل‌های ۴ تا ۶ به نمایش گذاشته شده است. مدل اغتشاش نیز همان $k-\epsilon$ استاندارد انتخاب شده است. توزیع تخلخل در بسترها یکنواخت و همه جا برابر 0.37 است. کاملاً مشخص است که سیال به محض ورود به بسترها انرژی خود را از دست می‌دهد. در حقیقت انرژی داخلی سیال، صرف انجام واکنش‌های مربوطه می‌شود. پروفایل دمایی در بسترها تحت تأثیر هیدرودینامیک فرآیند، توزیع شعاعی را نشان می‌دهد. به طور کلی افت دمایی در بستر



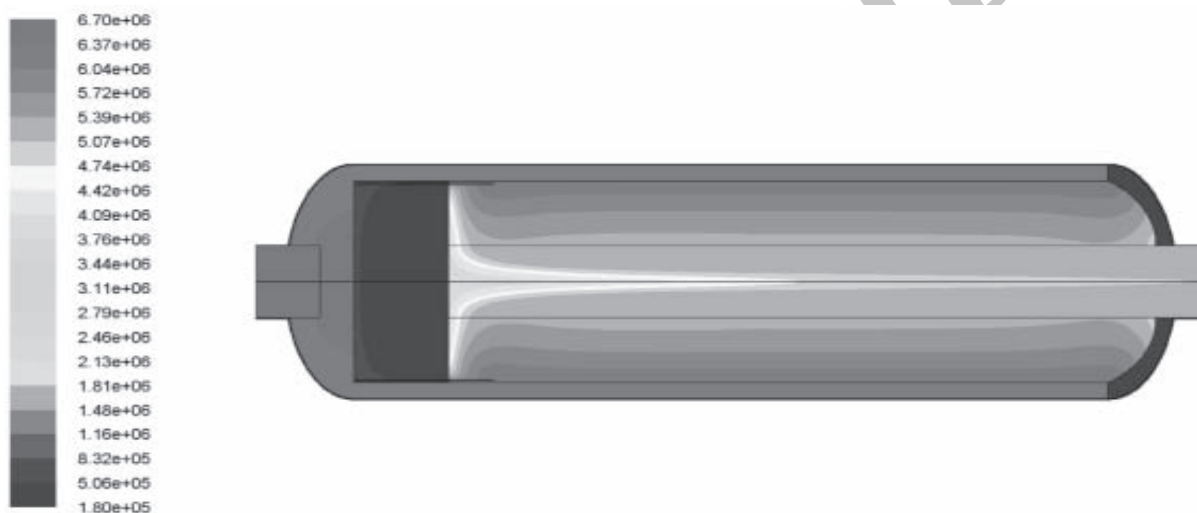
شکل ۴- کانتورهای دما بر حسب درجه فارنهایت برای رآکتور اول



شکل ۵- کانتورهای دما بر حسب درجه فارنهایت برای رآکتور دوم



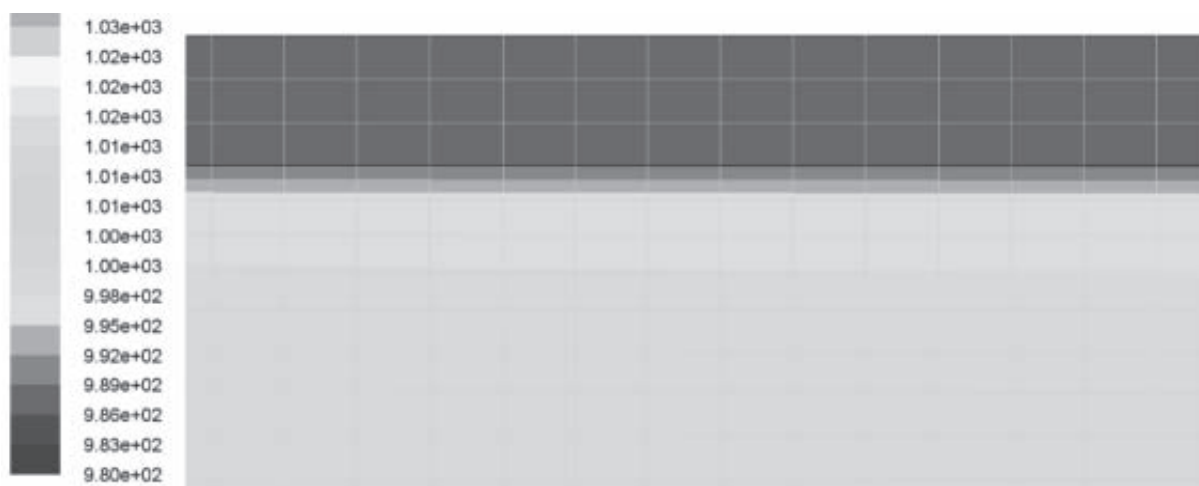
شکل ۶- کانتورهای دما بر حسب درجه فارنهایت برای رآکتور سوم



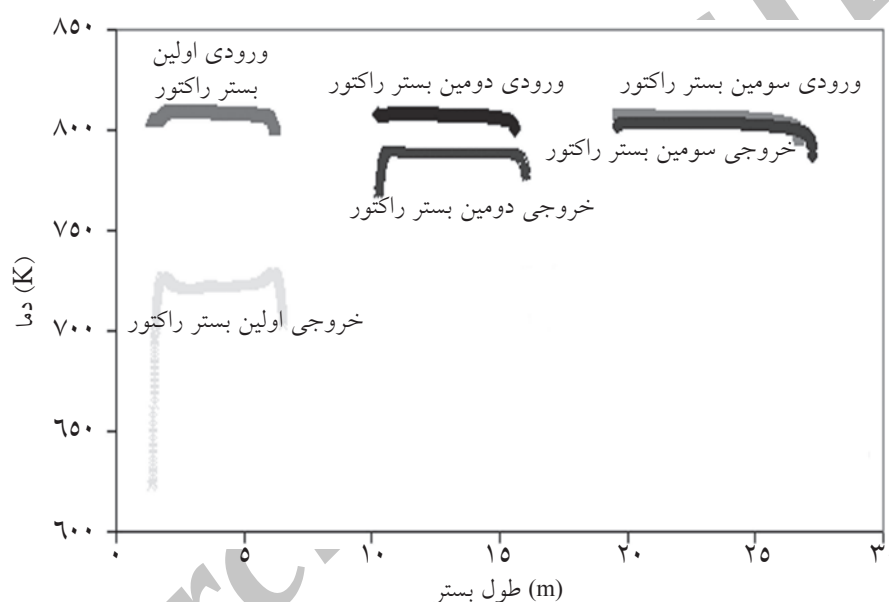
شکل ۷- کانتورهای آنتالپی ویژه (J/kg) برای اولین رآکتور

خروجی محیط متخلخل) یکنواخت‌تر باشد، کمک بیشتری به افزایش درصد تبدیل خواهد کرد. این توزیع دما در شکل ۹ رسم شده است. در این بخش با جلوگیری از افت دما در سیستم و بسترها، شرایط مناسب‌تری را برای انجام واکنش‌های مطلوب آماده کرده‌ایم. شکل ۹ نشان می‌دهد که توزیع دما در طول سومین بستر مناسب است، اما بسترهای دوم و اول مخصوصاً در خروجی‌ها توزیع نامناسبی دارند. مجاورت با ناحیه خالی از کاتالیست برای این بسترها و دمای پایین ناحیه خالی از کاتالیست، باعث این اثر نامطلوب شده است. احتمالاً با حذف این ناحیه می‌توان از این پدیده نامطلوب جلوگیری کرد. افت دمای دو بستر اول و دوم زیاد است، ولی این افت دما که ناشی از وقوع واکنش‌های مطلوب گرماگیر می‌باشد، اجتناب‌ناپذیر است.

شکل ۷ به درستی نشان می‌دهد که جریان از مناطق خالی از کاتالیست و منطقه پر شده از سیمان عبور نمی‌کند. این مناطق تنها حاوی آنتالپی استاتیک هستند و فقط انرژی داخلی دارند و آنتالپی جریانی آنها برابر صفر است. با بررسی بیشتر مشاهده شد که با توجه به اینکه جنس پوسته رآکتور از فلز است و ضریب هدایت حرارتی بالایی دارد، گرادیان دمایی قابل توجهی در پوسته رآکتورها وجود ندارد (با وجود انتخاب ۳-۴ لایه شبکه‌بندی شده). این مسأله خود یک مزیت به شمار می‌آید. زیرا وجود گرادیان دمایی در دیواره‌ها سبب انتقال حرارت به بیرون از رآکتورها می‌شود (شکل ۸). بیشترین افت دمایی مربوط به مناطق مرکزی اولین رآکتور است که خوشبختانه در واکنش شرکت ندارند. هرچقدر توزیع دما در سبدهای توزیع‌کننده ورودی به بستر و خروجی از آن (مرزهای ورودی و



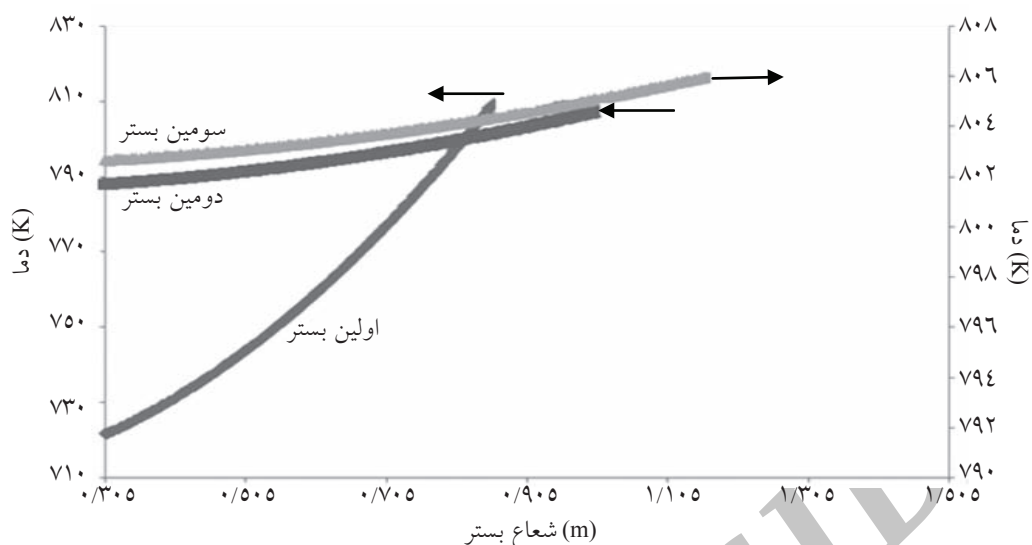
شکل ۸- کانتورهای دما بر حسب درجه فارنهایت در ناحیه پوسته رآکتور اول



شکل ۹- توزیع دما در طول بسترها برای سیستم اصلی

انتقال حرارت شعاعی است (زیرا انتقال حرارت هدایتی و جابه‌جایی متناسب با گرادیان دما هستند)، از بستر اول به سوم کاهش می‌یابد. پس بیشینه انتقال حرارت در بستر اول و پس از آن در بستر دوم و در آخر هم در بستر سوم اتفاق می‌افتد. این پدیده‌ها را می‌توان از کانتورهای دما در شکل‌های ۴ تا ۶ نیز استنباط نمود. جدول ۳ دماهای به دست آمده در ورودی‌ها و خروجی‌ها و مقدار انحراف آنها را در مقایسه با مقدار تجربی نشان می‌دهد. ستون دوم جدول ۳ نشان می‌دهد که طراحی کوره‌ها به درستی انجام شده و این کوره‌ها به خوبی از عهده تأمین دما در ورودی‌ها برآمده‌اند.

با این حال می‌توان به میزان ناچیزی از افت فیزیکی (و نه شیمیایی) حرارت جلوگیری کرد. مثلاً با عایق‌کاری بهتر پوسته رآکتور می‌توان مقدار کمی از افت دما را از بین برد. به طور طبیعی در انتهای خروجی سبدها دما تا اندازه‌ای افت پیدا می‌کند. این افت می‌تواند به علت کاهش انرژی سیال ناشی از انتقال حرارت با دیواره یا منطقه پر شده از سیمان باشد. نمودار افت دما در بسترها بر حسب شعاع در وسط هر سه بستر در شکل ۱۰ رسم شده است. این شکل نشان می‌دهد که با نزدیک شدن به مرکز، دما کاهش می‌یابد. بیشترین مقدار شیب در شکل ۱۰، متعلق به بستر اول است. به طور کلی این شیب که مقدار آن بیان‌گر بزرگی



شکل ۱۰- توزیع دما در بسترهای کاتالیستی بر حسب شعاع

جدول ۳- مقادیر به دست آمده دما برای ورودی و خروجی رآکتورها به همراه مقادیر واقعی آنها

درصد خطای نسبی (%)	دمای خروجی محاسباتی (K)	دمای خروجی طراحی (K)	درصد خطای نسبی (%)	دمای ورودی محاسباتی (K)	دمای ورودی طراحی (K)	رآکتور
۵/۲۳	۷۲۱/۶۹	۷۶۱/۴۸۳۳	۰	set	۸۱۰/۹۲۸۷	اول
۱/۵۴	۷۸۸/۰۷	۸۰۰/۳۷۲۲	۰/۲	۸۰۹/۲۶۸	۸۱۰/۹۲۸۷	دوم
۰/۹۰	۸۰۲/۴۹	۸۰۹/۸۱۶۷	۰/۴۴	۸۰۷/۳۷۶	۸۱۰/۹۲۸۷	سوم

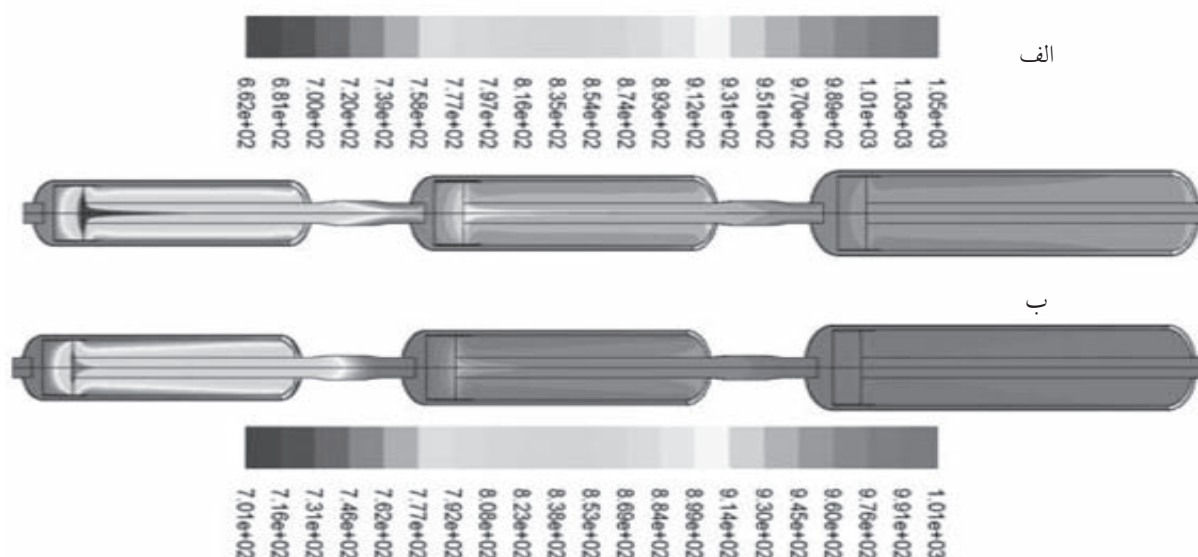
بررسی مدل‌های اغتشاش

در این قسمت مدل‌های مختلف اغتشاش با توابع دیواره متفاوت به کار رفته است. انتظار می‌رود که در قسمت کوره‌ها، تمام سیال به صورت حجمی و به طور یکنواخت گرم شود، در حالی که مطابق شکل (۱۱-الف)، این اتفاق در خصوص مدل اغتشاش k-ε استاندارد رخ نداده است. در حقیقت سیال در قسمت‌های نزدیک دیواره به دمای مطلوب رسیده است. حال آنکه توده سیال هنوز تحت تأثیر منبع حرارتی قرار نگرفته است. هر چند در ادامه، سیال به دلیل عبور از توزیع کننده‌ها و به علت تشکیل گردابه‌های شدید و اختلاط بالا، از نظر دمایی به توازن می‌رسد، اما همین امر باعث افت دما در توزیع کننده‌ها و وارد شدن مقداری خطا در محاسبات می‌شود. زیرا توزیع دما در ورودی تمامی رآکتورها تخت و یکنواخت و برابر 1000°F فرض شده است.

مقادیر به دست آمده برای افت دمای بسترهای اول، بستر دوم و سوم، انتقال حرارت از اولین، دومین و سومین رآکتور به محیط، شار حرارتی هریک و کل هدر رفت حرارت از سیستم به ترتیب برابرند با: $86/8\text{ K}$ ، $18/9\text{ K}$ ، $3/1\text{ K}$ ، W ، 87515 W ، 123464 W ، 1564 W/m^2 ، 1569 W/m^2 و 278888 W . مشخص است که شار حرارتی هدر رفت هر سه رآکتور تقریباً یکسان است. توافق بسیار خوبی بین داده‌های شبیه‌سازی و داده‌های تجربی به طوری که بیشترین خطای محاسباتی کمتر از ۶٪ است. بیشترین افت دما مربوط به اولین رآکتور با حدود 87 K می‌باشد. اجراهای متعددی در این قسمت بر اساس سیستم اصلی پایه گذاری شدند. از عملی ترین راه حل‌ها برای کاهش هدر رفت انرژی، عایق‌بندی رآکتور است. زیرا یک عملیات خارجی به حساب می‌آید و بر جزئیات داخلی رآکتورها اثری ندارد.

مدل‌های اغتشاش دیگری نیز امتحان شده‌اند. به عنوان مثال برخی از پارامترهای حرارتی مؤثر برای چندین مدل اغتشاش مهم در جدول ۴ فهرست شده‌اند. در این قسمت بنا بر یک نتیجه گیری کیفی (که در بالا ذکر شده است) مدل RSM به عنوان بهترین مدل معرفی می‌شود. جدول ۴ نشان می‌دهد که مقدار هدررفت حرارتی از سیستم به شدت به مدل اغتشاش وابسته است و وابستگی کمتری به توابع دیواره یا تنظیم رینولدز دیواره^۲ دارد. بیشترین مقدار هدر رفت از سیستم، مربوط به مدل RSM است که پیشتر به عنوان بهترین مدل شبیه‌ساز حرارتی از نظر کیفی معرفی شده بود.

بنابراین در صورت وجود پراکندگی محوری در توزیع دما (مانند شکل ۱۱-الف)، خطای محاسباتی شامل تمامی شبیه‌سازی‌های مشابه می‌شود. از بین مدل‌های استفاده شده توربولنسی، دو مدل Realizable k-ε و RSM^۱ بهترین شرایط را برای کوره‌ها پیش‌بینی کرده‌اند و پراکندگی محوری دما را بسیار کم نشان داده‌اند. به عنوان مثال شکل (۱۱-ب) کانتورهای دمایی مربوط به مدل RSM را به عنوان بهترین مدل شبیه‌ساز کوره‌ها با تابع دیواره استاندارد و عدد رینولدز دیواره بین ۳۰ تا ۳۰۰ نشان می‌دهد. مطابق شکل ۱۱-ب، عمل اختلاط در کوره‌ها به نحو مطلوبی انجام شده و پراکندگی محوری توزیع دما ناچیز است.



شکل ۱۱- کانتورهای دما (F) در کل سیستم به دست آمده از مدل الف) k-ε استاندارد و ب) RSM

جدول ۴ - مقادیر به دست آمده هدر رفت حرارتی برای مدل‌های توربولنسی مختلف

مدل اغتشاش	تابع دیواره	محدوده y-plus	هدررفت حرارت از رآکتور اول (W)	هدررفت حرارت از رآکتور دوم (W)	هدررفت حرارت از رآکتور سوم (W)	هدررفت حرارت کل (W)
Standard k-ε	استاندارد	$10 > y+ > 40$	۶۷۹۰۹	۸۷۵۱۵	۱۲۳۴۶۴	۲۷۸۸۸۹
Standard k-ε	استاندارد	$30 > y+ > 300$	۶۷۹۴۶	۸۷۴۳۲	۱۲۳۳۰۷	۲۷۸۶۸۶
RNG-k-ε	لگاریتمی	$y+ > 5$	۶۷۷۸۰	۸۷۲۳۸	۱۲۲۸۰۴	۲۷۷۸۲۱
Realizable-k-ε	لگاریتمی	$y+ > 5$	۶۷۶۷۶	۸۷۲۰۲	۱۲۲۷۴۸	۲۷۷۶۲۶
Spalart-Allmaras	-	$y+ = 1$	۶۷۵۹۳	۸۷۱۱۶	۱۲۲۷۴۱	۲۷۷۴۵۰
RSM	استاندارد	$30 > y+ > 300$	۶۷۴۰۷	۸۸۱۸۰	۱۲۵۰۵۳	۲۸۰۶۴۱

1. Reynolds Stress Model

2. Y-plus

بهبود شرایط عایق

با توجه به عملی بودن و راحتی استفاده از عایق، یکی از بهترین راه‌های بهینه‌سازی فرآیند، طراحی دوباره عایق‌های مورد استفاده است. برای این منظور چندین اجرای مختلف برای کمینه کردن هدررفت حرارت انجام شده است. در یکی از اجراها، ضخامت عایق دو برابر یعنی 0.1 m فرض شده است. در اجرای بعدی فرض گردیده که از عایق دیگری با خواص حرارتی متفاوت استفاده شده است. این عایق نوعی آزیست معدنی با ظرفیت گرمایی ویژه 920 J/kg.K و ضریب هدایت حرارتی 0.06 W/m.K و دانسیته 1600 kg/m^3 است [۱۹]. همچنین ایده‌آل‌ترین حالت عایق‌کاری یعنی وجود عایق با ضریب هدایت حرارتی صفر نیز شبیه‌سازی شده است. جدول ۵ مقادیر هدررفت از هر رآکتور را به همراه مقدار کلی آن برای این اجراها نشان می‌دهد. مطابق نتایج ارائه شده در جدول ۵، از نظر

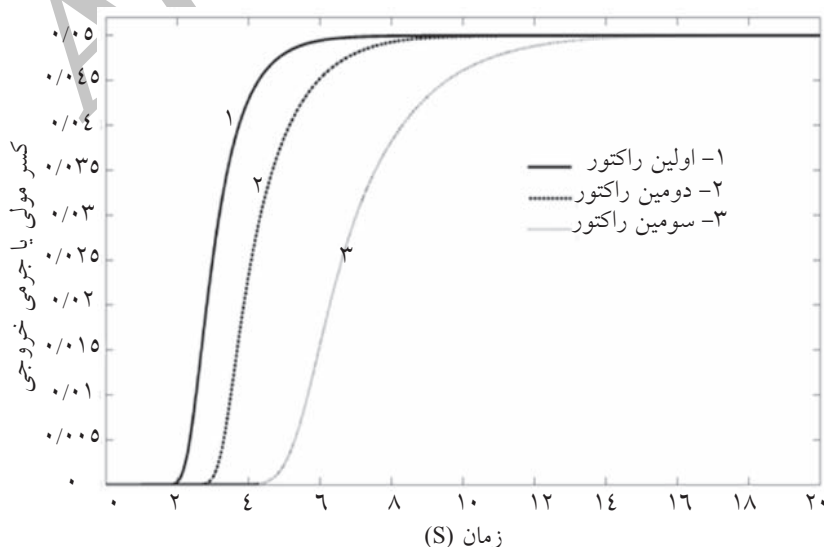
ارزش حرارتی، دو برابر کردن ضخامت عایق فعلی برابر با استفاده از یک عایق معدنی بهتر است. لذا از این لحاظ تنها محاسبات اقتصادی تأثیرگذار خواهد بود. به هر حال هر یک از این دو راه که برای سیستم اصلی اجرا شود، بیش از ۳۸٪ از اتلاف حرارتی را کم خواهد کرد.

توزیع زمان اقامت

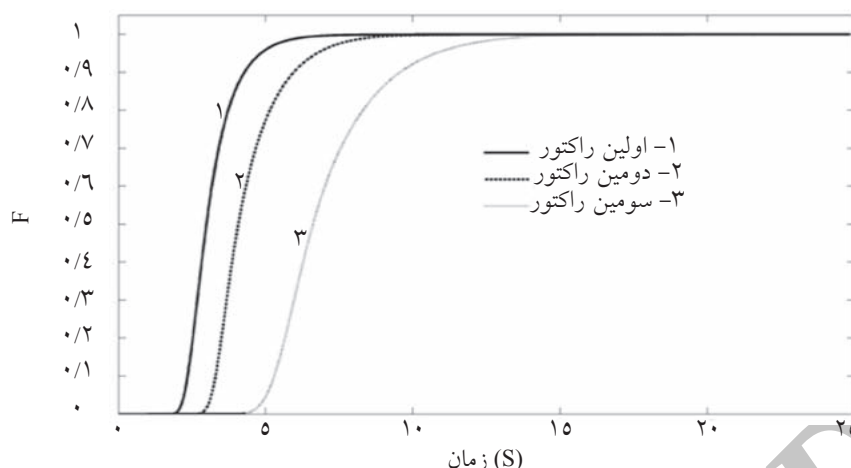
شکل ۱۲ منحنی‌های کسر مولی غلظت خروجی ردیاب فرضی را در سه رآکتور واحد تبدیل کاتالیستی به طور جداگانه نشان داده است (در حالت عملیاتی). هرچه این منحنی‌ها عمودی‌تر باشند، به حالت ایده‌آل و مطلوب نزدیک‌تر هستند. لذا می‌توان نتیجه گرفت که انحراف از حالت ایده‌آل در رآکتور سوم بیشتر از دوم و رآکتور دوم بیشتر از اول می‌باشد. با رسم منحنی F از روی داده‌های شکل ۱۲، به نموداری مشابه شکل ۱۳ خواهیم رسید.

جدول ۵ - مقادیر به دست آمده هدررفت حرارتی برای شرایط گوناگون عایق‌کاری با فرض مدل اغتشاش $k-\varepsilon$ استاندارد

نحوه عایق‌کاری	هدررفت حرارت از رآکتور اول (W)	هدررفت حرارت از رآکتور دوم (W)	هدررفت حرارت از رآکتور سوم (W)	هدررفت حرارت کل (W)
سیستم واقعی	۶۷۹۰۹	۸۷۵۱۵	۱۲۳۴۶۴	۲۷۸۸۸۹
عایق با ضخامت دو برابر (۱۰ سانتی‌متر)	۴۰۸۳۹	۵۲۶۹۴	۷۴۴۴۵	۱۶۷۹۷۷
عایق با خواص جدید ($k=0.06 \text{ W/m.K}$)	۴۰۸۳۶	۵۲۶۷۲	۷۴۴۴۷	۱۶۷۹۵۵
حالت ایده‌آل عایق‌کاری	۰	۰	۰	۰



شکل ۱۲- نمودار کسر مولی یا جرمی ردیاب در خروجی سه رآکتور واحد تبدیل کاتالیستی



شکل ۱۳- منحنی F سه راکتور واحد تبدیل کاتالیستی

صورت جداگانه محاسبه شود. هر چه این زمان زیادتر بوده و منحنی توزیع زمان اقامت متقارن تر و نازک تر باشد، مقدار درصد تبدیل بیشتر خواهد بود. عدد پکلت معکوس پارامتر معروف پراکندگی یا $\left(\frac{D}{uL}\right)$ است.

$$Pe = \frac{1}{D/uL} \quad (10)$$

عدد پراکندگی نیز باید توسط محاسبات RTD که در مرجع [۱۴] ذکر شده است، محاسبه شود. ضریب پراکندگی (D) بر حسب $\left(\frac{m^2}{s}\right)$ است که مقادیر زیاد آن بیانگر پراکندگی زیاد جریان می باشد. اگر D به سمت صفر میل کند، جریان به حالت پیستونی نزدیک خواهد شد و اگر به سمت ∞ میل کند، جریان مختلط است. L بعد مشخصه سیستم بر حسب متر و u سرعت متوسط جریان در یک مقطع خاص بر حسب متر بر ثانیه است. برای محاسبه غلظت های متوسط در خروجی لزوماً باید از منحنی های E استفاده نمود تا بتوان مقدار دقیق غلظت را پیش بینی کرد. لذا اگر مدل سازی بر پایه حل ریاضیاتی ساده شده انجام شود، غلظت جزء A در خروجی باید توسط رابطه زیر محاسبه شود:

$$\frac{\bar{c}_A}{c_{A0}} = \int_0^\infty \left(\frac{c_A}{c_{A0}}\right)_{\text{element}} \cdot E \cdot dt \quad (11)$$

در واقع غلظت ها در هر Δt که محاسبه می شوند، باید در تابع RTD ضرب شوند و نهایتاً انتگرال زمانی این تابع بر روی زمان کل، مقدار جزء A را در خروجی به دست می دهد. از دیگر پارامترهای مهم و اثرگذار بر روی درصد تبدیل،

شکل ۱۲ نشان می دهد که یک ذره سیال نهایتاً می تواند تا ۱۵ ثانیه در راکتور سوم محبوس شود. باید توجه داشت که از نقطه نظر سینتیکی، علاوه بر ایده آل بودن جریان، زمان تماس نیز پارامتر مهمی است. به عبارت دیگر در واکنش های کاتالیستی معمولاً هر قدر زمان تماس سیال با جامد زیادتر باشد، درصد تبدیل افزایش خواهد یافت. از دو اصل کلی بالا می توان نتیجه گرفت که بهترین منحنی آن است که کاملاً عمودی باشد اما تا حد امکان در راستای مثبت محور زمان جابه جا شده باشد (زمان متوسط اقامت سیال بیشتر باشد). از این حیث راکتور سوم عملکرد بهتری را نشان می دهد. اما در عوض انحراف آن از حالت پیستونی بیشتر است. این موضوع که کدام یک از این دو اثر غالب هستند، بستگی به سینتیک واکنش ها و عوامل متعدد دیگری دارد که از حوصله این بحث خارج است. می توان از نمودارهای شکل ۱۳ به صورت موضعی مشتق گرفت و شیب نمودار را در هر زمان خاص به دست آورد. این مقادیر برای تهیه نمودار E لازم و ضروری هستند. در خصوص منحنی E باید گفت که هر چه این منحنی تیزتر بوده و به سمت راست متمایل تر باشد، سیستم مورد نظر کارکرد بهتری خواهد داشت. در ادامه می توان عدد پکلت (Pe) که نشان دهنده مقدار پراکندگی محوری یا شعاعی جریان از حالت ایده آل (جریان کاملاً پیستونی) است را از داده های توزیع زمان اقامت محاسبه کرد. برای این منظور لازم است زمان اقامت متوسط (t_m) برای هر راکتور به

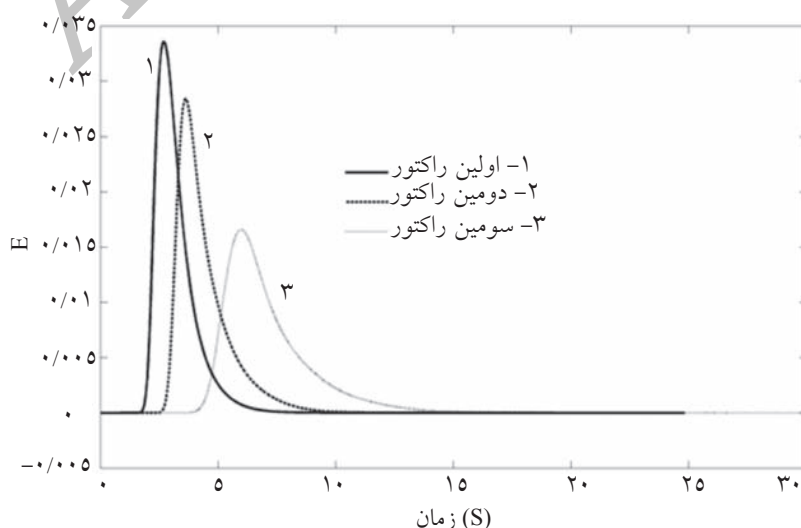
استفاده باقی می‌ماند، زیرا جریان چرخشی داخل بستر کاتالیستی مشاهده شده است. جریان چرخشی مشابهی در رآکتورهای دوم و سوم گزارش نشده است اما در عوض در قسمت‌های انتهایی بسترها پدیده برگشت سیال از لوله مرکزی به داخل بستر مشاهده می‌شود که شدت آن از رآکتور اول به رآکتور سوم افزایش می‌یابد. پارامتر پراکندگی به خوبی این نتایج را تأیید می‌کند.

در شکل ۱۴ نمودار E برای سیستم متشکل از سه رآکتور واحد تبدیل کاتالیستی که به طور سری به هم متصل شده‌اند، رسم شده است. این سیستم نمایه فرضی از سیستم متوالی اصلی است که مزایایی را علاوه بر شبیه‌سازی‌های تکی رآکتورها به دنبال دارد. در واقع هر سه رآکتور به صورت کلی و سری به عنوان یک سیستم در نظر گرفته شده‌اند. شکل ۱۵ منحنی کسر مولی/جرمی ردیاب را در خروجی رآکتور سوم بر حسب زمان نشان می‌دهد. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، طیف وسیعی از شرایط عملکردی برای سیستم بررسی شده‌اند که شرح هر یک از آنها در ادامه خواهد آمد.

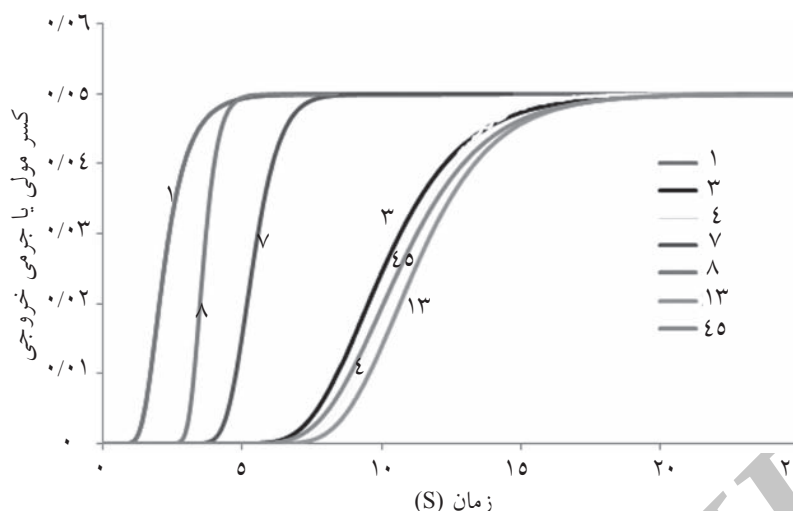
زود مخلوط شوندگی و دیر مخلوط شوندگی است. به هر حال این موضوع به اثبات رسیده که برای واکنش‌هایی که درجه کلی آنها بزرگ‌تر از یک است، دیر مخلوط شوندگی به نفع پیشرفت واکنش است. لذا باید در تمامی بسترهای کاتالیستی تسهیلاتی را اتخاذ کنیم که از مخلوط شدن جریان‌ها باهم جلوگیری کند. زیرا درجه تمامی واکنش‌های مطلوب تبدیل کاتالیستی بیشتر از ۱ می‌باشد. در ادامه پراکندگی هریک از رآکتورها را که با استفاده از روابط مرجع [۱۴] به دست آمده، گزارش خواهیم کرد. شرح محاسبات پراکندگی برای هر سه رآکتور پالایشگاه تهران به صورت جداگانه و به طور خلاصه در جدول ۶ آمده است. همان‌گونه که جدول ۶ نشان می‌دهد، پارامتر پراکندگی برای تمامی رآکتورها بیش از مقدار ۰/۰۱ است. به بیان دیگر، مقدار انحراف از حالت جریان کاملاً پیستونی زیاد است. نتایج ارائه شده در این جدول نشان می‌دهد که رآکتور دوم نسبت به رآکتور اول و سوم در شرایط بهتری است. دقیقاً چنین نتیجه‌ای در مطالعات قبلی برای حالت عملکردی رآکتور گرفته شده است [۶]. نتایج مؤید این مطلب است که قسمتی از بالای بستر رآکتور اول بدون

جدول ۶- شرح خلاصه محاسبات پراکندگی و عدد پکلت

رآکتور	$t_{\square}$ (s)	σ^2 (s ²)	σ_{θ}^2 (بدون بعد)	$\frac{D}{uL}$ (بدون بعد)	Pe (بدون بعد)
اول	۱۳/۹۹۳۷	۳۹/۴۰۲۸	۰/۲۰۱۲	۰/۱۱۳۵	۸/۸۱۰۶
دوم	۱۱/۷۹۴۹	۱۹/۱۰۵۳	۰/۱۳۷۳	۰/۰۷۴۱	۱۳/۴۹۵۳
سوم	۷۷/۵۸۷۵	۱۶۵۹/۱	۰/۲۷۵۶	۰/۱۶۵	۶/۰۶۰۶



شکل ۱۴- منحنی E سه رآکتور واحد تبدیل کاتالیستی

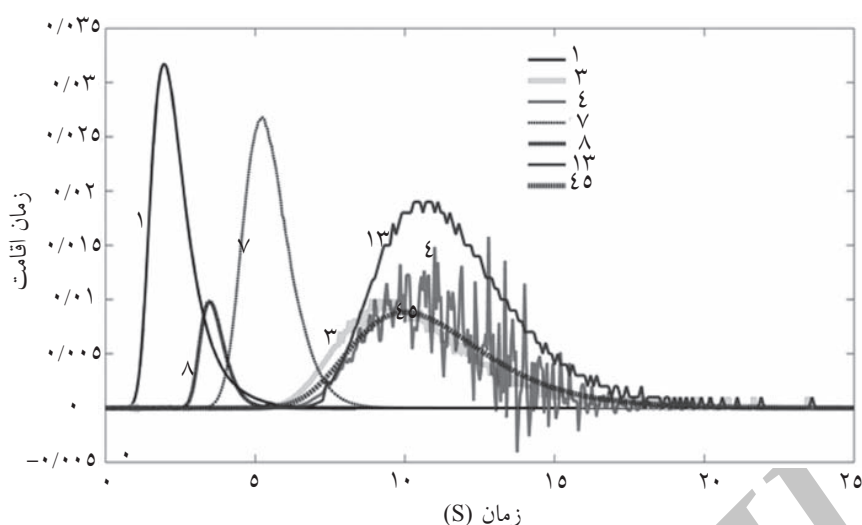


شکل ۱۵- نمودار کسر مولی یا جرمی ردیاب در خروجی رآکتور سوم واحد تبدیل کاتالیستی برای اجراهای مختلف در حالتی که هر ۳ رآکتور به طور سری پشت سر هم قرار گرفته باشند.

تا سه برابر حالت طراحی بررسی شده است. اجرای ۱۳ مطابق با تغییر هندسی رآکتورها در ظرفیت طراحی می‌باشد که در آنها سپر داخل بستر حذف شده و منطقه خالی از کاتالیست با کاتالیست جدید پر شده است. اجرای ۴۵ نیز همان اجرای ۳ است که در آن مدل اغتشاش عوض شده است. منحنی توزیع زمان اقامت موارد بالا به صورت شکل ۱۶ به دست می‌آید. پس از انجام محاسبات مربوطه، مقادیر پارامتر پراکندگی برای سیستم‌های فوق در جدول ۷ فهرست شده است. همان‌گونه که این جدول نشان می‌دهد، بهترین توزیع جریان در مورد اجرای ۴ به دست آمد که در آن جریان به حالت ایده‌آل پیستونی بیشتر شباهت دارد. در واقع با افزایش مقاومت غریبالها، جریان‌های برگشتی در انتهای بسترها حذف خواهد شد. اما منحنی توزیع زمان اقامت این اجرا، نوسانات متعددی را حول مقدار متوسط خود نشان می‌دهد که از نظر عملیاتی مناسب نیست. اجرای ۱۳ نشان می‌دهد که با حذف سپر از سیستم، جریان حالت بهتری پیدا می‌کند و به حالت پیستونی نزدیک‌تر می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که افزایش ظرفیت به بهبود رژیم جریان و کم کردن پراکندگی کمک خواهد کرد. البته باید توجه داشت که در این موارد، زمان تماس سیال با بستر واکنشی کمتر از حالت معمول بوده و ممکن است درصد تبدیل کاهش یابد.

یکی از سؤال‌های مطرح این است که آیا مقادیر مقاومت‌های سر راه جریان بر روی پراکندگی و توزیع زمان اقامت سیال اثر گذارند یا خیر. اجرای ۱ در شکل ۱۵ این حالت خاص را توصیف می‌کند که در آن تمامی مقاومت‌های سبدهای توزیع کننده سیال در بستر و توزیع کننده ورودی برابر صفر فرض شده‌اند. در واقع توزیع کننده‌ها هیچ مقاومتی بر سر راه سیال ایجاد نکرده‌اند. دبی ورودی این اجرا مطابق با شرایط طراحی (ظرفیت اسمی) برابر با سرعت $15/848 \text{ m/s}$ انتخاب شده است. در بخش قبلی برای رآکتورهای جداگانه، دبی مطابق با شرایط عملکردی در نظر گرفته شده بود. اجرایی که با نمایه ۳ در شکل ۱۵ رسم شده است، بیان‌گر حالت واقعی سیستم با وجود مقاومت‌های توزیع کننده‌ها تحت شرایط طراحی می‌باشد.

اجرای ۴ نیز همان شرایط طراحی را بیان می‌کند که در آن مقاومت‌های توزیع کننده‌ها بیشتر از مقدار واقعی انتخاب شده‌اند. نمایه ۷ مربوط به شرایط مشابه طراحی است اما با افزایش ظرفیت به میزان دو برابر. در واقع سرعت در ورودی برابر $31/696 \text{ m/s}$ انتخاب شده است که دو برابر مقدار پیشنهادی در ظرفیت اسمی است. بدیهی است که افزایش ظرفیت نیز می‌تواند به میزان زیادی بر روی الگو و پراکندگی جریان اثر گذار باشد. در نمایه ۸ افزایش ظرفیت



شکل ۱۶- نمودار توزیع زمان اقامت برای شرایط مختلف عملیاتی در حالتی که هر ۳ راکتور به طور سری پشت سر هم قرار گرفته باشند.

جدول ۷- شرح محاسبات توزیع زمان اقامت جهت به دست آوردن عدد پراکندگی در سیستم سری از راکتورها

اجرا	$t_{\square}$ (s)	σ^2 (s ²)	$\sigma\theta^2$ (بدون بعد)	$\frac{D}{uL}$ (بدون بعد)	Pe (بدون بعد)
۱	۱۳/۶۵۴۶	۴۲/۵۵۸۳	۰/۲۲۸۳	۰/۱۳۱۵	۴/۳۸۰۲
۳	۳۹/۶۶۷۴	۲۸۷/۲۹۵۳	۰/۱۸۲۶	۰/۱۰۱۶	۵/۴۷۶۵
۴	۱۶/۶۵۴۳	۱۳/۵۰۸۳	۰/۰۴۸۷	۰/۰۲۵	۲۰/۵۳۳۹
۷	۱۰/۰۵۴۳	۷/۳۲۳۶	۰/۰۷۲۴	۰/۰۳۷۶	۱۳/۸۱۲۲
۸	۵/۰۸۵۳	۱/۵۸۶۲	۰/۰۶۱۳	۰/۰۳۱۶	۱۶/۳۱۳۲
۱۳	۴۲/۵۵۷۴	۳۲۲/۰۱۴۰	۰/۱۷۷۸	۰/۰۹۸۶	۱۰/۱۴۲۰
۴۵	۳۳/۳۸۸۵	۱۷۰/۳۴۷۱	۰/۱۵۲۵	۰/۰۸۳۲	۶/۵۵۷۶

نتیجه‌گیری

طبق بررسی‌های انجام گرفته و شبیه‌سازی‌های مختلف با شرایط مرزی متفاوت مشخص شد که می‌توان اتلاف حرارت از سیستم را نسبت به مقدار کنونی حدود ۴۰٪ کاهش داد. این عمل به افزایش عدد اکتان در خروجی می‌انجامد که لازمه رسیدن به آن دو برابر کردن ضخامت عایق فعلی راکتورها یا تعویض عایق فعلی با عایق دیگری با ضریب هدایت حرارتی کمتر است. مدل اغتشاش RSM اختلاط حرارتی حجمی بهتری را نسبت به دیگر مدل‌های اغتشاش نشان داده است. این مدل میزان اتلاف حرارت را بیشتر از دیگر مدل‌ها پیش‌بینی کرده است. نتایج این مطالعه نشان می‌دهد که توابع دیواره و محدوده y-plus اثر ناچیزی بر روی نتایج حرارتی دارند. مقدار بیشینه درصد

خطای نسبی در مقایسه با داده‌های تجربی جهت پیش‌بینی دما در کل سیستم کمتر از ۶٪ می‌باشد که نشان‌دهنده دقت بالا و معتبر بودن نتایج دینامیک سیالات محاسباتی است. بررسی منحنی‌های زمان اقامت برای راکتورهای تکی نشان داد که پارامتر پراکندگی به ترتیب از راکتور سوم به اول و دوم کاهش می‌یابد. در واقع راکتور دوم در مقایسه با دو راکتور دیگر عملکرد بهتری از خود نشان می‌دهد، زیرا عدد پکلت آن بزرگ‌تر از دیگر راکتورها است. انجام آزمایش زمان اقامت سیال با استفاده از تکنیک دینامیک سیالات محاسباتی مؤید این مطلب است که این روش بر دیگر مدل‌سازی‌های ریاضی برتری دارد و ضمن شبیه‌سازی می‌تواند هیدرودینامیک سیستم را نیز بررسی نماید. مطابق نتایج به دست آمده، افزایش مقاومت توزیع

$\bar{t}$: زمان متوسط اقامت سیال

T : دما

u : سرعت متوسط سیال

v : سرعت موضعی سیال، دبی حجمی

V : حجم

x : مختصات محوری

γ^+ : عدد رینولدز دیواره

زیر نویس

eff : مقدار مؤثر

f : مایع

i : مؤلفه یک متغیر برداری در جهت i

r : مؤلفه جهتی شعاعی یک متغیر برداری

s : جامد

T : اغتشاش

x : مؤلفه جهتی محوری یک متغیر برداری

z : مؤلفه جهتی زاویه ای یک متغیر برداری

علائم لاتین

p : دانسیته

μ : ویسکوزیته

α : نفوذ پذیری

μ_f : ویسکوزیته گردابه ای

ε : نرخ اتلاف انرژی جنبشی اغتشاش

σ_e : ضریب ثابت

σ_k : ضریب ثابت

γ : تخلخل

$\bar{t}$: تنسور تنش

σ_θ^2 : واریانس بدون بعد

σ^2 : واریانس

θ : نسبت زمان به زمان متوسط اقامت

کننده های جریان، منجر به یکنواختی بیشتر جریان شده و پارامتر پراکندگی را کاهش می دهد. افزایش ظرفیت در ورودی نیز به ایده آل شدن جریان کمک می کند، هر چند زمان ماند سیال داخل رآکتورها را کاهش می دهد. حذف سپر از سیستم نیز که جزء بهینه سازی های هندسی و ساختاری به حساب می آید، در مدل سازی دینامیکی سیال قابل بررسی است و نتایج حاصل از آن نشان می دهد که با حذف سپر از داخل رآکتورها، هیدرودینامیک جریان بهبود یافته و جریان به حالت پیستونی نزدیک تر می شود.

علائم و نشانه ها

C_1, C_2 : عدد ثابت در معادله ۷

C_2 : ضریب مقاومت اینرسی

$\bar{C}_A$: غلظت متوسط جزء A

C_{A0} : غلظت اولیه جزء A

C_A : غلظت جزء A

D : ضریب پراکندگی

E : انرژی کل، توزیع سن سیال خروجی

F : مشتق E نسبت به زمان، منبع نیرو

G : تولید اغتشاش

h : انتالپی محسوس

j : شار نفوذی جرمی

k : ضریب هدایت حرارتی، انرژی جنبشی اغتشاش

L : بعد مشخصه

p : فشار

Pe : عدد بدون بعد پکلت

r : مختصات شعاعی

S_m : منبع جرمی

S_f^h : منبع انتالپی سیال

t : زمان

مراجع

- [1]. Padmavathi G. and Chaudhuri K. K., "Modeling and simulation of commercial catalytic naphtha reformers", Can. J. Chem. Eng., Vol. 75, No. 10, pp. 930-937, 1997.
- [2]. Smith R. B., "Kinetic analysis of naphtha reforming with platinum catalyst", Chem. Eng. Prog., Vol. 55, No. 6, pp. 76-80, 1959.
- [2]. Fazeli A., Fatemi Sh., Mahdavian M. and Ghaee A., "Mathematical modeling of an industrial naphtha reformer with three adiabatic reactors in series", Iran. J. Chem. Chem. Eng., Vol. 28, No. 3, 97-102, 2009.
- [3]. Zafar Q., Gevert B. and Von Sivers M., "Statistical model for benzene prediction in catalytic reforming", Prepr. Pap.-Am. Chem. Soc., Div. Fuel Chem., Vol. 48, No. 2, 660-661, 2003.
- [4]. Arani H. M., Shirvani M., Safdarian K. and Dorostkar E., "Lumping procedure for kinetic model of catalytic naphtha reforming", Braz. J. Chem. Eng., Vol. 26, No. 4, 723-732, 2009.
- [5]. Weifeng H., Hongye S., Yongyou H. and Jian C., "Modeling, Simulation and optimization of a whole industrial catalytic naphtha reforming process on Aspen Plus platform", Chinese. J. Chem. Eng., Vol. 14, No. 5, 584-591, 2006.
- [6]. Mohammadikhah R., Ziyari A., Behjat Y., Ahmadi-Marvast M., Ayazi M. and Nikbakht M., Removing mal-distribution through a radial-flow fixed bed reactor using CFD, 6th Int. Chem. Eng. Cong., 16-20 November, Kish Island, Iran, 2009.
- [7]. Mohammadikhah R., Behjat Y., Ahmadi-Marvast M. and Nikbakht M., Ganji H., *CFD application in capacity enhancement of naphtha catalytic reforming unit of Tehran refinery*, 14th Int. Oil. Gas. Petro. Cong., 19-20 may, Tehran, Iran, 2010.
- [8]. Ranade V. V., "Computational flow modeling for chemical reactor engineering", Vol. 5, Academic Press., London, UK, 2002.
- [۹] محمدیخواه ر., گنجی ح., احمدی م., زاهدی س., حمزوی ا., دهقانی ا., بررسی اثر تغییر و توزیع تخلخل بر روی هیدرودینامیک رآکتورهای صنعتی تبدیل کاتالیستی پالایشگاه تهران, سومین کنفرانس ملی کاربرد CFD در صنایع شیمیایی و نفت, دانشگاه علم و صنعت ایران, ایران, ۱۳۹۰.
- [10]. Mohammadikhah R., Ganji H., Ahmadi-Marvast M. and Zahedi Abghari S., "Turbulence model inspection for hydrodynamics of naphtha catalytic reactors", 7th International Chemical Engineering Congress & Exhibition, 21-24 November, Kish Island, Iran, 2011.
- [11]. Mohammadikhah R., Zahedi Abghari S., Ahmadi-Marvast M. and Ganji H., *CFD simulation of catalytic naphtha reforming process*, 7th International Chemical Engineering Congress & Exhibition, 21-24 November, Kish Island, Iran, 2011.
- [12]. K.A. Hoffmann, S.T. Chiang, *Computational fluid dynamics*, 4th Ed, Engineering Education SystemTM, Wichita, USA, 2000.
- [13]. FLUENT.6.3 User's Guide, FLUENT. Inc, USA, 2006.
- [14]. Levenspiel O., *Chemical reaction engineering*, 2nd Ed, Wiley & Sons, New York, 1972.
- [15]. Library of Tehran Refinery, Unifiner-Platformer manual: PFD No. RD-2-002, RD-202-4251, RD-202-4252,

RD-203-4253, 2009.

[16]. ANH Refractories Europe Ltd, www.anheurope.co.uk, 22.2.2010.

[17]. Nayyar I., Mohinder L., *Piping Handbook*, 7th Ed, Mc Graw Hill, New York, 2000.

[18]. Reid R. C., Prausnitz J. M., and Sherwood T. K, *The properties of gases and liquids*, 3rd Ed., Mc Graw-Hill Inc., pp.108-109, 1977.

[19]. Perry R. H. and Green D. W., *Perry's chemical engineering handbook*, 7th Ed, Mc Graw-Hill Inc., New York, 1997.

[20]. Stijepovic M. Z., Ostojic A. V., Milenkovic I. and Linke P., "Development of a kinetic model for catalytic reforming of naphtha and parameter estimation using industrial plant data", *Energy & Fuel. J.*, Vol. 23, No. 6, pp.979-983, 2009.

[21]. Taskar U., *Modeling and optimization of a catalytic naphtha reformer*, Ph.D. Thesis, Texas Tech. University, USA, 1996.

Archive of SID