

شبیه‌سازی CFD عملکرد واکنشگاه (راکتور) تولید

انیدرید فتالیک پتروشیمی فارابی

مجید قمری^۱، سید حسن هاشم آبادی^{۲*}

۱- کارشناس ارشد مهندسی شیمی دانشگاه علم و صنعت ایران

۲- دانشیار مهندسی شیمی، دانشگاه علم و صنعت ایران

تاریخ دریافت: ۹۳/۰۴/۱۳ تاریخ پذیرش: ۹۳/۰۹/۲۴

پیام نگار: Hashemabadi@iust.ac.ir

چکیده

در این مقاله شبیه‌سازی عملکرد واکنشگاه لوله ای^۱ با بستر ثابت کاتالیست، به منظور تولید انیدرید فتالیک با استفاده از روشهای دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) بررسی شده است. به این منظور بر اساس سینتیک واکنش‌های مورد نظر، معادلات تغییرات درصد تبدیل انیدرید فتالیک و نیز معادلات تغییرات دما در طول واکنشگاه با اعمال شرایط مرزی، در نرم‌افزار FEMLAB مدل‌سازی شده است. به منظور اعتبار سنجی و پیش‌بینی درصد تبدیل محصول مطلوب و نیز مکان تشکیل نقطه داغ^۲ در طول واکنشگاه، نتایج شبیه‌سازی با مقادیر عملیاتی واحد تولید انیدرید فتالیک پتروشیمی فارابی مقایسه شد، که حاکی از دقت مناسب شبیه‌سازی به کار رفته است. توزیع دما و میزان تبدیل انیدرید فتالیک در طول واکنشگاه به ازای پارامترهای عملیاتی متفاوتی از قبیل دبی خوراک، غلظت خوراک، دمای ورودی و دمای دیواره بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهند که مکان تشکیل نقطه داغ، به علت بالا بودن آهنگ واکنش در ابتدای راکتور است. دمای حمام نمک^۳ عامل مهمی در بهره‌برداری از واکنشگاه اکسایش ارتوزایلین است به طوری که حتی با افزایش ۱°C دمای حمام نمک، سرعت واکنش بالاتر می‌رود و در نتیجه درصد تبدیل ارتوزایلین نیز افزایش می‌یابد.

کلیدواژه‌ها: انیدرید فتالیک، دینامیک سیالات محاسباتی، واکنشگاه چند لوله‌ای پر شده، نقطه داغ، حمام نمک

۱- مقدمه

دستیابی به محصول مطلوب، نقطه داغ و غلظت خروجی که متغیرهای مهم کنترل‌اند، به طور همزمان مهار شوند. از مشکلات پیش رو می‌توان به دسترس نبودن اندازه‌گیری برخط^۴ و مداوم غلظت محصول و نیز ابهامات زیادی اشاره کرد که از پیچیدگی واکنش‌های شیمیایی و فرایندهای فیزیکی انتقال به وجود می‌آیند [۱ و ۲]. تاکنون مطالعاتی در زمینه مدل‌سازی برای بررسی تغییرات دما و تعیین نقطه داغ در یک واکنشگاه بستر ثابت و نیز بررسی میزان تأثیر کاتالیستها انجام شده است [۳]. در سال‌های

واکنشگاههای بستر ثابت در صنعت اهمیت زیادی دارند. به طوری که تلاشهای بسیاری برای پیش‌بینی رفتار دینامیکی و طراحی سیستم‌های کنترل آنها متمرکز شده است. افزون بر این، برای واکنشگاه بستر ثابت که واکنش گرمازا در آن انجام می‌شود، لازم است برای جلوگیری از افزایش بیش از حد دمای واکنشگاه و

* تهران، دانشگاه علم و صنعت ایران، دانشکده مهندسی شیمی، آزمایشگاه تحقیقاتی دینامیک سیالات محاسباتی (CFD)

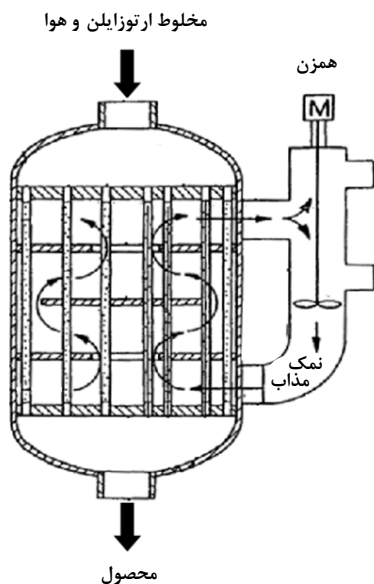
1. Multitube
2. Hot Spot
3. Salt Bath

4. Online

شرایط عملیاتی پتروشیمی فارابی مورد بررسی شده است. سرانجام، پارامترهای عملیاتی متفاوتی از قبیل سرعت خوراک، غلظت خوراک، دمای ورودی و دمای دیواره بررسی شده است.

۲- معادلات و شرایط مرزی حاکم بر جریان

در واکنشگاه صنعتی، مخلوط ارتوزایلن و هوا به نسبت ۴۴ گرم ارتوزایلن در هر متر مکعب هوا، که غلظتی زیر حد انفجار است، وارد یک واکنشگاه چند لوله‌ای می‌شود. واکنشگاه شامل ۱۴۹۲۸ عدد لوله به طول ۳ متر است. این لوله‌ها به طور عمودی و موازی با یکدیگر در واکنشگاه قرار گرفته‌اند، لوله‌ها با کاتالیست V_2O_5/TiO_2 پر شده‌اند. برای خارج کردن گرمای ناشی از واکنش، لوله‌ها توسط نمک مذاب که پیوسته بوسیله یک همزن جاری است، احاطه شده‌اند. در شکل (۱)، طرح نموداری ساده شده از واکنشگاه پتروشیمی فارابی را مشاهده می‌کنید.



شکل ۱. طرح نموداری ساده شده واکنشگاه صنعتی.

به دلیل کوچک بودن قطر لوله‌های به کار رفته در این واکنشگاه و بالا بودن گرادیان شعاعی دما، می‌توان نتیجه گرفت که مدل یک بعدی نمی‌تواند برای توصیف این سیستم کافی باشد. از این رو، این واکنشگاه لوله‌ای به صورت دو بعدی و با فرض تقارن محوری مدل قرار می‌گیرد. واکنش تولید انیدرید فتالیک یک واکنش اکسایش سریع است که در صورت عدم کنترل صحیح دما و سایر شرایط عملیاتی، به تولید محصولات ناخواسته اکسیدهای کربن

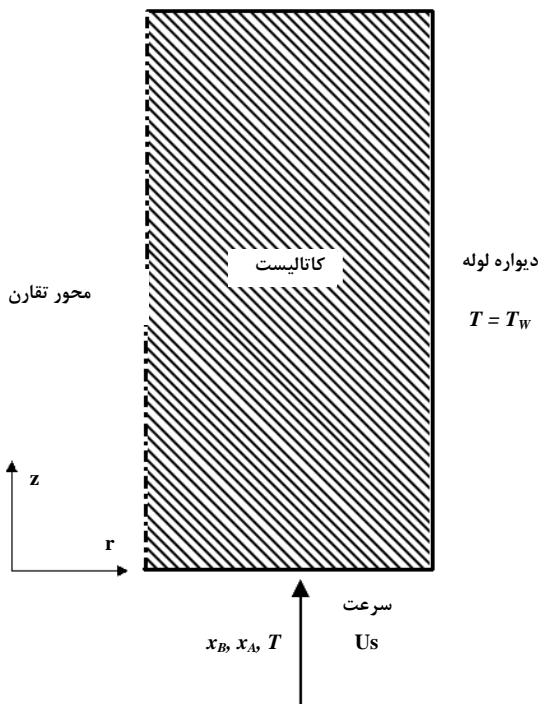
اخیر، توجه زیادی به بهینه کردن بازده فرایندهای تولید، کمینه‌سازی مواد نامطلوب به دلیل عملیات زیست محیطی و افزایش سودآوری کارخانه‌ها مبذول شده است. روش سنتی تولید مواد از آزمایشگاه به مقیاس نیمه صنعتی و سپس به مقیاس صنعتی به دلیل هزینه‌های زیاد آن مقرون به صرفه نیست. بنابراین استفاده از روش‌های محاسباتی ضروری است. دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) برای مهندسان فرایند این امکان را فراهم می‌آورد تا درک و پیش‌بینی مطلوب جریان سیال را در تجهیزات فرایند به‌دست آورند و طراحی را تغییر دهند. کاربرد CFD به کوتاه‌تر شدن مسیرهای پیش‌بینی شده برای تولید محصول، بهینه‌سازی فرایندهای موجود برای بهبود بازده انرژی و طراحی مناسب فرایندها و محصولات جدید منجر می‌شود [۴و۵].

انیدرید فتالیک یک ماده شیمیایی با کاربردهای گسترده است و در ساخت تعداد زیادی از مواد شیمیایی صنایع مهم مصرف می‌شود. این ماده یکی از مهمترین مواد واسطه میانی در صنعت پلاستیک‌سازی است. اهمیت این ماده کاربردی سبب شده است تا در فرایند تولید این ماده مطالعات زیادی صورت گیرد [۶]. روش تولید انیدرید فتالیک در طی نیم قرن اخیر دچار تحولات بسیاری شده است. روش‌های قبلی نظیر اکسایش نامستقیم نفتالین در فاز مایع، جای خود را به روش اکسایش مستقیم ارتوزایلن در فاز گاز در واکنشگاهی با بستر ثابت کاتالیستی داده است که امروزه چون استفاده از ارتوزایلن در مقایسه با نفتالین به عنوان ماده اولیه مشکلات کمتری دارد، طراحی تمامی واحدهای جدید بر مبنای استفاده از ارتوزایلن صورت می‌گیرد. از مشکلات مصرف نفتالین در تولید انیدرید فتالیک می‌توان به عدم خلوص بالا و در دسترس نبودن آن اشاره کرد. از سویی، مزایای استفاده از ارتوزایلن به عنوان خوراک واکنشگاه را می‌توان در داشتن خلوص بالای محصولات تولیدی در خروجی از واکنشگاه، طول عمر بیشتر کاتالیست و فراوانی ارتوزایلن دانست [۷]. واکنشگاه مورد بررسی، یک واکنشگاه چند لوله‌ای است. واکنش‌هایی که در این واکنشگاه رخ می‌دهند به شدت گرم‌زا هستند و برای جلوگیری از ایجاد شرایط نامطلوب، نمک مذاب بعنوان سیال مبرد در پوسته واکنشگاه برای سرد کردن دیواره لوله‌های حاوی کاتالیست V_2O_5/TiO_2 مورد استفاده قرار می‌گیرد.

در این مطالعه، شبیه‌سازی CFD واکنشگاه تولید انیدرید فتالیک با

چندلوله‌ای استفاده می‌شود، که به دلیل کوچک شدن ضخامت بستر کاتالیست، سرعت انتقال گرما افزایش می‌یابد. در واکنشگاه پتروشیمی فارابی، تعداد ۱۴۹۲۸ لوله با قطر ۲/۵ سانتی‌متر و طول ۳ متر بهره گرفته شده است.

طرح نموداری از یک لوله واکنشگاه و شرایط مرزی حاکم را در شکل (۳) مشاهده می‌کنید. جریان گاز از پایین به بالا در حرکت است. با فرض وجود تقارن، هندسه سه بعدی را می‌توان به دو بعدی تبدیل کرد.



شکل ۳. طرح نموداری از یک لوله واکنشگاه.

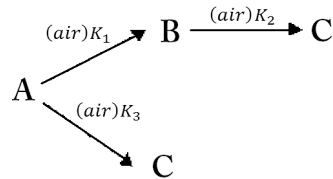
معادلات حاکم برای این سیستم در شرایط پایا، شامل معادله موازنه جرم و انرژی، از این قرار است [۱۰ و ۱۱]:

$$\nabla \cdot (-D_{eff} \nabla x_i + u_s x_i) = \frac{\rho_b}{c_{tot} \gamma_{A0}} r_i \quad (۶)$$

$$\nabla \cdot (-\lambda_{eff} \nabla T' + u_s \rho_g c_p T') = \rho_b (\sum_i -\Delta H_i r_i) \quad (۷)$$

در این مدل، توزیع غلظت مواد و دما، علاوه بر جهت حرکت توده سیال، در جهت شعاع نیز در نظر گرفته شده است. با در نظر گرفتن $x_A = 1 - (x_B + x_C)$ تنها به حل دو معادله موازنه جرم نیاز است. با توجه به شکل (۳) و بر اساس قانون پایستگی جرم، معادلات

منجر می‌شود. از سوی دیگر، اکسایش مستقیم ارتوزایلین در مجاورت کاتالیزور معمولاً به تولید محصولات متنوعی می‌انجامد. از آنجا که درصد محصولاتی چون مالئیک انیدرید و اسید بنزوئیک بسیار پایین است، می‌توان از این واکنش‌ها در مدل سیستم چشم پوشید. سینتیک واکنش از این قرار است [۸ و ۹]:



شکل ۲. مسیرهای واکنش: A ارتوزایلین، B انیدرید فتالیک و C کربن مونوکسید و دی اکسید.

گرمای واکنش‌ها، به ترتیب، ۳۰۷ و ۱۰۹۰ کیلوکالری بر گرم مول ارتوزایلین است. معادلات سرعت و ثابت سرعت واکنش برای واکنش‌های بالا از این قرارند [۸]:

$$r_1 = K_1 P_A P_O; \ln K_1 = \frac{-27000}{RT} + 19.837 \quad (۱)$$

$$r_2 = K_2 P_B P_O; \ln K_2 = \frac{-31000}{RT} + 20.86 \quad (۲)$$

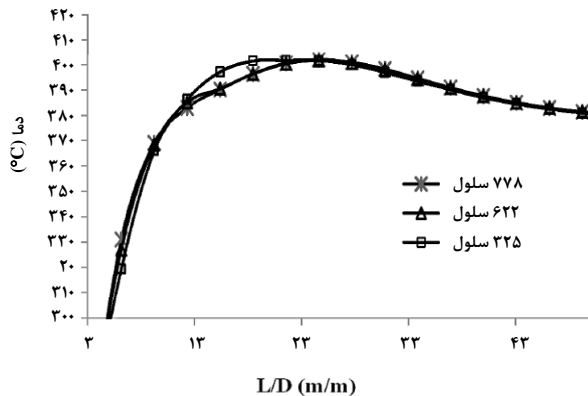
$$r_3 = K_3 P_A P_O; \ln K_3 = \frac{-28600}{RT} + 18.97 \quad (۳)$$

معادلات بالا را می‌توان برای سرعت‌های تولید انیدرید فتالیک و اکسیدهای کربن بر حسب مقدار درصد تبدیل هر یک از قرار زیر نوشت:

$$r_B = r_1 - r_2 = P_t^2 \gamma_{O_0} \gamma_{A_0} [K_1 (1 - X_B - X_C) - K_2 X_B] \quad (۴)$$

$$r_C = r_2 + r_3 = P_t^2 \gamma_{O_0} \gamma_{A_0} [K_2 X_B + K_3 (1 - X_B - X_C)] \quad (۵)$$

کنترل واکنش‌های غیر آدیباتیک از دیدگاه دمایی همواره یکی از مسائل پیچیده در طراحی این واکنشگاه‌هاست. به همین دلیل در طراحی واکنشگاه‌های مربوط به چنین واکنش‌هایی، به منظور حل معضل انتقال گرما در این سیستم‌ها، همواره از واکنشگاه‌های



شکل ۴. بررسی استقلال مش با استفاده از تغییرات دما در ابتدای واکنشگاه.

برای درستی آزمایشی شبیه‌سازی، تغییرات دمایی در طول واکنشگاه با نتایج موجود در واحد تولیدی پتروشیمی فارابی مقایسه شده است. سپس، تأثیر پارامترهایی چون دمای خوراک، دمای سیال خنک‌کننده، سرعت و غلظت سیال ورودی، بر تغییرات دمایی در طول واکنشگاه و میزان درصد تبدیل نهایی انیدرید فتالیک بررسی شده است.

جدول ۱. شرایط عملیاتی و مشخصات واکنشگاه انیدرید فتالیک پتروشیمی فارابی.

مقدار	پارامتر (واحد)
۳۴۴۰	ارتوزایلن در خوراک (kg/hr)
۵۸۸۰۰	هوا در خوراک (kg/hr)
۱۵۸	دمای خوراک (°C)
۳۶۰	دمای سیال خنک‌کننده (نمک مذاب) (°C)
۱۴۹۲۸	تعداد لوله‌ها
۲/۵	قطر لوله (cm)
۳	طول لوله (m)
۱/۴۵	فشار (atm)
۱۰۴۶	ظرفیت گرمایی خوراک (J/(kg.K))
۰/۷۹	ضریب رسانش گرمایی بستر (W/(m.K))
۳/۱۹e ^{-۷}	ضریب نفوذ (m ² /s)

مربوط به تغییرات درصد تبدیل انیدرید فتالیک و اکسیدهای کربن درون واکنشگاه از این قرار است:

$$\nabla \cdot (-D_{eff} \nabla x_B + u_s x_B) = \frac{\rho_b}{c_{tot} \gamma_{A0}} r_B \quad (8)$$

$$\nabla \cdot (-D_{eff} \nabla x_C + u_s x_C) = \frac{\rho_b}{c_{tot} \gamma_{A0}} r_C \quad (9)$$

با استفاده از معادله موازنه انرژی درون واکنشگاه نیز، معادله توزیع دمایی در شرایط پایا از این قرار است:

$$\nabla \cdot (-\lambda_{eff} \nabla T' + u_s \rho_g c_p T') = \rho_b [(-\Delta H_1) r_B + (-\Delta H_3) r_C] \quad (10)$$

شرایط مرزی برای این سیستم نیز به صورت زیر است. در ورودی واکنشگاه، غلظت‌ها صفر و دما T₀ است. در خروجی نیز فرض می‌شود که انتقال گرما و انتقال جرم به صورت جابه‌جایی باشد.

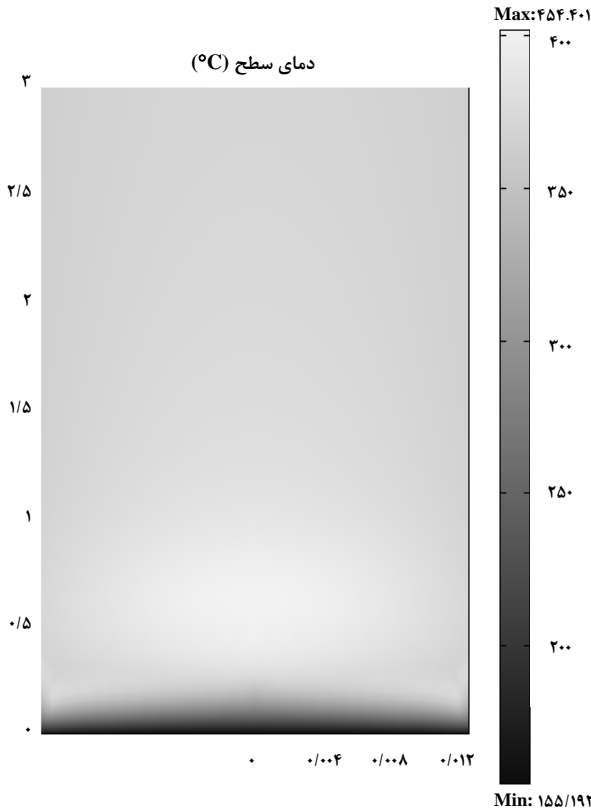
$$Z = 0 \begin{cases} T = T_0 \\ x_A = x_{A0} \\ x_B = 0 \\ x_C = 0 \end{cases} \quad (11)$$

$$r = R \begin{cases} \frac{\partial x_B}{\partial r} = \frac{\partial x_C}{\partial r} = 0 \\ \lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial r} = -h_{gc}(T - T_j) \end{cases} \quad (12)$$

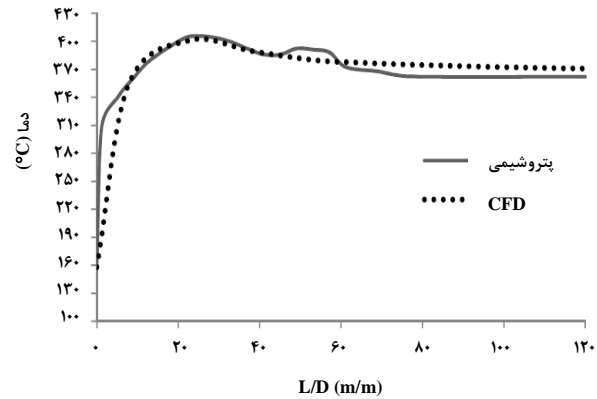
۳- نتایج و بحث

در ابتدا، تعیین استقلال مش، با بررسی تأثیر تعداد سلول‌ها بر دقت نتایج عددی برای مش‌هایی با تعداد ۷۷۸، ۶۲۲، ۳۲۵ سلول به کار برده شده است. همان‌طور که در شکل (۴) مشاهده می‌شود، تغییرات دمای بستر در طول واکنشگاه، زمانی که از مش با ۶۲۲ سلول استفاده شده است، در مقایسه با استفاده از سلول‌های با اندازه ریزتر، یعنی ۷۷۸ سلول، تفاوت چندانی ندارد. از این رو با اطمینان از نتایج خروجی نرم افزار و با هدف صرفه جویی در زمان محاسبات، مش با ۶۲۲ سلول به عنوان مش استقلال یافته در شبیه‌سازی‌های مراحل بعدی به کار گرفته شده است.

که در دماهای بالاتری از حمام نمک، نقطه داغ ظاهر می شود و حتی دمای بخشی از بستر در سطح بالایی باقی می ماند.

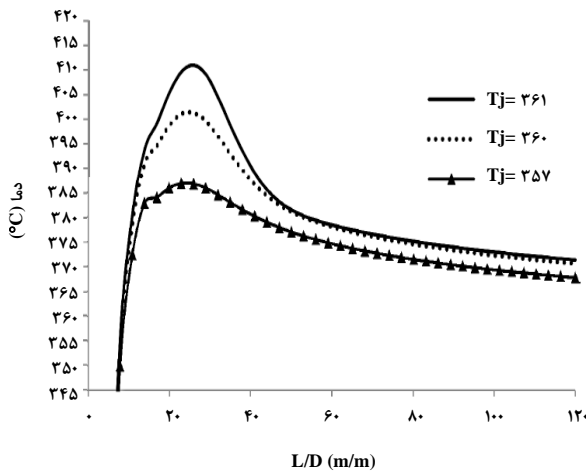


در شکل (۵)، تغییرات دمای بستر بر حسب طول واکنشگاه برای واحد انیدرید فتالیک پتروشیمی فارابی و شبیه سازی CFD نشان داده شده است. دمای ورودی به واکنشگاه ۱۵۸ درجه سلسیوس است که به تدریج افزایش چشمگیری را نشان می دهد. مطابق شکل، نقطه داغ به علت بالا بودن سرعت واکنش در ابتدای واکنشگاه، در ورودی واکنشگاه ایجاد می شود. نیز، با مقایسه دو نمودار، برای موقعیت و مقدار نقطه داغ که در صنعت مهم است، با هم انطباق خوبی دارند، که دقت بالای شبیه سازی را نشان می دهند.



شکل ۵. تغییرات دمای بستر برای واحد انیدرید فتالیک پتروشیمی فارابی و شبیه سازی CFD.

شکل ۶. کانتور دما در طول واکنشگاه و نمایش مکان نقطه داغ در واکنشگاه.

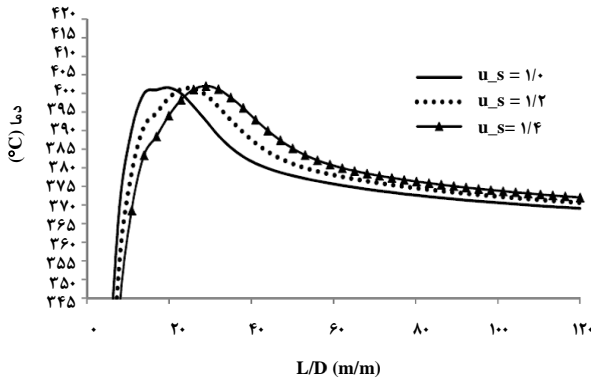


شکل ۷. تغییرات دمای بستر واکنشگاه در طول واکنشگاه در دماهای مختلف سیال خنک کننده.

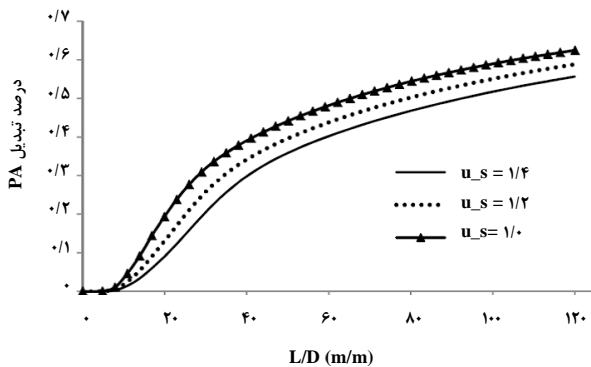
در شکل (۶)، توزیع دمایی در داخل واکنشگاه را مشاهده می کنید. مشاهده می شود که مکان نقطه داغ، در طول ۰/۶ m از ابتدای لوله واکنشگاه اتفاق می افتد که دمای آن معادل ۴۰۲ درجه سلسیوس است. اما در ادامه، به دلیل مصرف شدن بخش عمده ای از ماده اولیه، میزان انجام واکنش کاهش می یابد و دمای واکنشگاه به تدریج در طول واکنشگاه کاهش می یابد.

در شکل های (۷) و (۸) تاثیر دمای سیال خنک کننده بر تغییرات دمای بستر و درصد تبدیل انیدرید فتالیک در طول واکنشگاه را مشاهده می کنید. نیمرخیهای دمای بستر واکنشگاه با افزایش دمای سیال خنک کننده تغییرات چشمگیری دارند. در دمای حمام نمک ۳۵۷°C نیمرخ دمای اندازه گیری شده در مرکز لوله نسبتاً پهن است، اما در دماهای حمام نمک ۳۶۰°C و ۳۶۱°C شاهد نقطه داغ آشکاری در مکان ۶۰ cm از ورودی واکنشگاه هستیم. نیمرخیهای دمایی به دست آمده نشان می دهند که دمای بستر کاتالیست را نمی توان در دمای حمام نمک نگه داشت. همچنین، مشاهده می شود

افزایش سرعت ورودی، دمای نقطه داغ به سمت خروجی واکنشگاه انتقال می‌یابد. در شکل (۱۱) تاثیر سرعت ورودی خوراک بر درصد تبدیل انیدرید فتالیک در طول واکنشگاه مشاهده می‌شود. با افزایش سرعت ورودی خوراک، درصد تبدیل کاهش می‌یابد، زیرا در واکنش‌های همدمای واکنشگاههای لوله‌ای، با افزایش سرعت خوراک، زمان ماند در واکنشگاه کاهش می‌یابد.

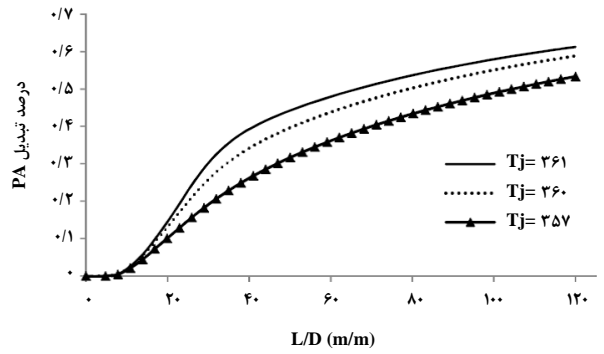


شکل ۱۰. تغییرات دمای بستر در طول واکنشگاه در سرعت‌های مختلف خوراک.



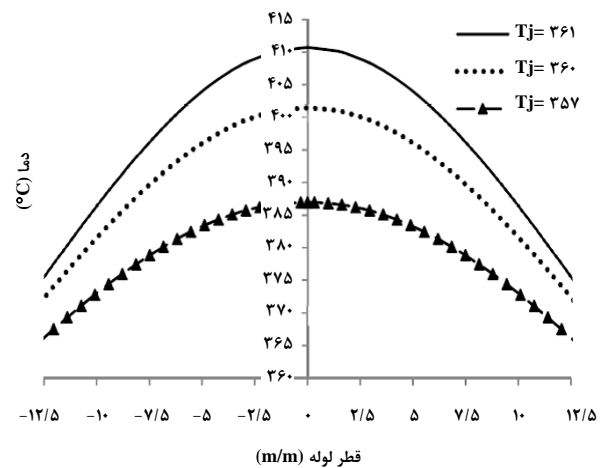
شکل ۱۱. درصد تبدیل انیدرید فتالیک در سرعت‌های مختلف خوراک

در شکل (۱۲) اثر افزایش غلظت ارتوزایلن خوراک بر توزیع دمای بستر در طول واکنشگاه مشاهده می‌شود، که شاهد افزایش دمای نقطه داغ ناشی از افزایش غلظت واکنش دهنده و بالا رفتن سرعت واکنش در منطقه‌ی ورودی واکنشگاه هستیم. از سوی دیگر، مکان نقطه داغ با افزایش غلظت ارتوزایلن تغییر نمی‌کند، زیرا با تغییر ترکیب خوراک، سرعت خطی جریان واکنش دهنده‌ها تقریباً یکسان است، به طوری که هیچ تغییری در محل نقطه داغ پیش نمی‌آید.



شکل ۸. تغییرات درصد تبدیل انیدرید فتالیک (PA) در طول واکنشگاه در دماهای مختلف سیال خنک کننده.

نمودار افزایش دما در بستر بر حسب مختصات شعاعی در ۰/۶m ابتدای واکنشگاه برای دماهای مختلف سیال خنک کننده در شکل (۹) ترسیم شده است. این شکل نشان می‌دهد که با نزدیک شدن به محور تقارن، دما افزایش می‌یابد. شیب این خطوط بیانگر بزرگی انتقال گرمای شعاعی است (زیرا انتقال گرمای رسانشی و جابه‌جایی، با گرادیان دمایی متناسب‌اند). از سوی دیگر، دما در طول محور تقارن به میزان چشمگیری بیشتر از دمای متوسط است. این مبنای می‌توان نتیجه گرفت که مدل یک بعدی نمی‌تواند برای توصیف این سیستم کافی باشد.

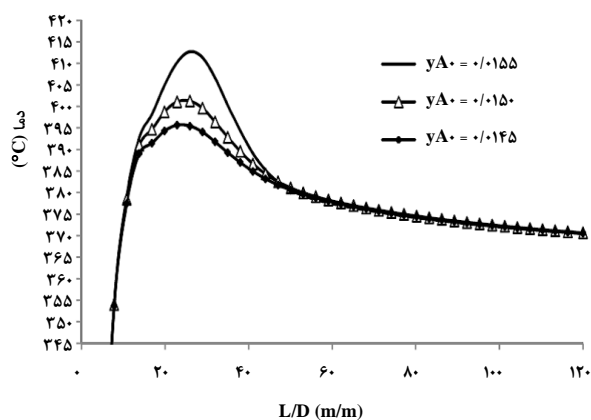


شکل ۹. تغییرات دما بر حسب قطر لوله واکنشگاه به ازای دماهای مختلف سیال خنک کننده.

در شکل (۱۰) اثر سرعت ورودی خوراک بر توزیع دمای بستر در طول واکنشگاه را مشاهده می‌کنید. نتایج نشان می‌دهند که با

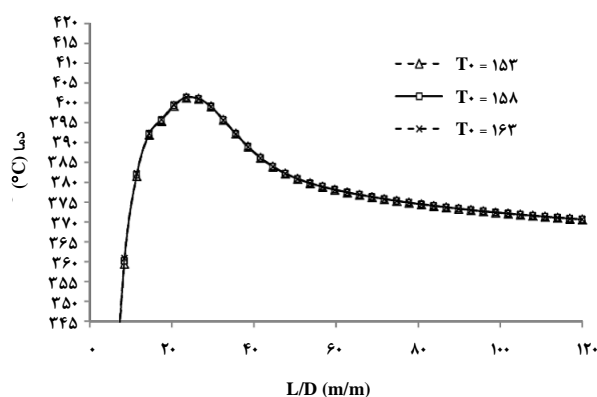
۴- نتیجه گیری کلی

مکان نقطه داغ به علت بالا بودن آهنگ واکنش در ابتدای واکنشگاه، در ورودی واکنشگاه تشکیل می‌شود. اما در ادامه، به دلیل مصرف شدن بخش عمده‌ای از ماده اولیه، میزان انجام واکنش کاهش می‌یابد و دمای واکنشگاه به تدریج در طول واکنشگاه کاهش می‌یابد. پارامترهای مختلفی مانند دمای خوراک، دمای حمام نمک و سرعت خوراک بر مقدار و مکان تشکیل نقطه داغ تاثیر می‌گذارند. نتایج نشان می‌دهند که دمای حمام نمک عامل مهمی در بهره برداری از واکنشگاه اکسایش ارتوزایلین است. به طوری که حتی با افزایش 1°C دمای حمام نمک، سرعت واکنش بالاتر می‌رود و در نتیجه درصد تبدیل ارتوزایلین نیز افزایش می‌یابد. اما این امر به معنی افزایش یکنواخت درصد تبدیل ماده مطلوب با دمای حمام نمک نیست، زیرا گرمای تولید شده ناشی از واکنش‌های گرمازا در این فرایند، سبب افزایش بیش از حد دمای واکنشگاه می‌شود و دمای بستر راکتور را از محدوده مجاز برای انجام واکنش مورد نظر محصول مطلوب و کنترل واکنشگاه خارج می‌کند. نیمرخهای دمایی به دست آمده نشان می‌دهند که دمای بستر کاتالیست را نمی‌توان در دمای حمام نمک نگه داشت. باید گفت که در دماهای بالاتری از حمام نمک، نقطه داغ ظاهر می‌شود و حتی دمای بخشی از بستر، در سطح بالایی باقی می‌ماند. علت این امر آن است که مقدار گرمای تولید شده از واکنش‌های اکسایش زیاد است و انتقال گرما به بیرون به علت رسانش گرمایی پایین بستر به آهستگی صورت می‌گیرد، به طوری که گرمای واکنش در داخل بستر انباشته و این گرما در بستر باعث می‌شود سرعت واکنش در واکنشگاه زیاد شود که به نوبه خود به تولید گرمای واکنش در یک مقدار زیاد و حتی بیشتر شدن سرعت واکنش منجر می‌شود. با افزایش سرعت ورودی، دمای نقطه داغ به سمت خروجی واکنشگاه انتقال می‌یابد، زیرا سرعت خطی جریان واکنش دهنده در واکنشگاه را برای پیش راندن مکان نقطه داغ به عقب افزایش می‌دهد. از سوی دیگر، با افزایش سرعت ورودی خوراک، درصد تبدیل کاهش می‌یابد، زیرا در واکنش همدمای واکنشگاه لوله‌ای با افزایش سرعت خوراک، زمان ماند در واکنشگاه کاهش می‌یابد. همچنین، نتیجه گرفته شد که در شرایط عملیاتی پتروشیمی فارابی ضرورتی برای بالا بردن دمای خوراک در ابتدای ورودی واکنشگاه وجود ندارد. تطابق نتایج شبیه سازی تغییرات



شکل ۱۲. تغییرات دمای بستر واکنشگاه در غلظت‌های مختلف ارتوزایلین.

در شکل (۱۳)، اثر دمای خوراک ورودی بر توزیع دمایی بستر در طول واکنشگاه، بررسی شده است. مشاهده می‌شود که با تغییر دمای 10°C درجه سلسیوس، خوراک ورودی، مکان و مقدار نقطه داغ تغییر نمی‌کند. مقدار بهینه دمای خوراک واکنشگاه، بسته به شرایط عملیاتی متغیر خواهد بود، اما معمولاً این دما در محدوده دمایی 350°C تا 380°C درجه سلسیوس قرار می‌گیرد. از سوی دیگر، در فشارهای بالای حدود 2 اتمسفر، دمای خوراک می‌تواند بسیار کمتر از حد ذکر شده باشد. مثلاً، فشار واکنشگاه واحد انیدریدفتالیک پتروشیمی فارابی حدود $1/45$ اتمسفر است که در این حالت دمای خوراک ورودی در حدود 158°C درجه سلسیوس کنترل می‌شود. علت این امر آن است که در شرایط فشار بالا، به دلیل وابستگی معادلات سرعت با توان دوم فشار، سرعت واکنش به حد کافی بالا خواهد بود تا بتواند گرمای لازم برای بالا بردن دمای خوراک را تامین کند.



شکل ۱۳. دمای بستر واکنشگاه در دماهای مختلف خوراک.

مراجع

- [1] Chou, Y. S., Wu, C. H., "Passivity-based control of the phthalic anhydride fixed-bed reactor", Chemical Engineering Science, 62, 1282–1297, (2007).
- [2] Park, Y. H., Kim, S. J., Kang, S. C., "Effect of the Reaction Bath Temperature in a Fixed-bed Reactor for Oxidation of o-Xylene over V_2O_5/TiO_2 Catalysts", Korean Journal of Chemical Engineering, 17, 81–85, (2000).
- [3] Anastasov, A. I., "A study of the influence of the operating parameters on the temperature of the hot spot in a fixed bed reactor", Chemical Engineering Journal, 86, 287–297, (2002).
- [4] Joshi, J. B., Ranade, V. V., "Computational Fluid Dynamics for Designing Process Equipment: Expectations, Current Status, and Path Forward", Ind. Eng. Chem. Res, 42, 1115–1128, (2003).
- [5] Guardo, A., Coussirat, M., Larrayoz, M. A., Recasens, F., Egusquiza, E., "CFD Flow and Heat Transfer in Nonregular Packings for Fixed Bed Equipment Design", Ind. Eng. Chem. Res, 43, 7049–7056, (2004).
- [6] Dias, C. R., Farinha Portela, M., Bond, G. C., "Oxidation of o-xylene to phthalic anhydride over V_2O_5/TiO_2 catalysts, II. Transient catalytic behavior", Journal of Catalysis, 157, 353–358, (1995).
- [7] Towae, F. K., Bhargava, N., "Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry", 20, Wiley-CCH, Weinheim, (1998).
- [8] Howard, R. F., "Chemical Reactor Design for Process Plants", 2nd edition, Wiley Interscience Publication, (1977).
- [9] Valera, A. E., Garcia, J. C., "Multiphysics Simulation of a Packed Bed Reactor", University of Carabobo, Valencia, Venezuela, COMSOL Conference, (2009).
- [10] Froment, G. F., Bischoff, K. B., "Chemical Reactor Analysis and Design", John Wiley & Sons, (1990).
- [11] Saterfield, C. N., "Heterogeneous Catalysis in Industrial Practice", Mc Graw-Hill, (1991).

دمایی در طول واکنشگاه با نتایج موجود در واحد تولید انیدرید فتالیک پتروشمی فارابی، حاکی از دقت مدل شبیه‌سازی شده است.

۵- علائم و نشانه‌ها

کسر مولی ارتوزایلن در ورودی	y_{A_0}
کسر مولی اکسیژن در ورودی	y_{O_0}
درصد تبدیل انیدرید فتالیک	x_B
درصد تبدیل اکسیدهای کربن	x_C
چگالی بستر	ρ_b
چگالی گاز	ρ_g
ضریب رسانش گرمایی بستر	λ_{eff}
گرمای واکنش	ΔH
سرعت ظاهری گاز	u_s
ضریب نفوذ	D_{eff}
غلظت کل	c_{tot}
ضریب کلی انتقال گرما	h_{gc}
دمای ورودی به واکنشگاه	T_0
دمای نمک مذاب	T_j