

مدلسازی فرآیند اکسایش زوجی متان

مهشید زرکش^۱، حسین بریجانیان^۱، ناصر رسولی^۱، فاطمه جدا^۱

۱: ایران - تهران - پژوهشگاه صنعت نفت

zarkeshm@ripi.ir ۱۴۶۶۵ - ۱۳۷ صندوق پستی

چکیده

در نگرش متداول از آن جهت که قادر به بیان تغییرات درجات آزادی حاکم در سیستم در نقاط مختلف نمی باشیم، چاره ای جز آزمایش برای دستیابی به ارتباط موجود در پارامترهای مختلف حاکم بر طراحی سیستم نیست. روابط تجربی بدست آمده از آزمایشات در محدوده ای از سیستم معتبر است که متغیرها در آنجا اندازه گیری شده اند، لذا جوابگوی تمام نیازها نمی باشند. در استفاده از روش مکانیک سیالات محاسباتی تغییرات تمام درجات آزادی در هر نقطه و زمانی قابل دسترسی است. این امکان از آن جهت حاصل می شود که معادلات بقا در قسمتهای بسیار کوچکی از سیستم اعمال و به صورت هم زمان حل می شود. در این تحقیق مدلسازی فرآیند اکسایش زوجی متان که یکی از فرآیندهای تبدیل مستقیم متان می باشد، مورد بررسی قرار گرفته است. محصول مطلوب این فرآیند اتیلن است. با حل همزمان معادلات واکنش توسط نرم افزار فلوئنت، اثرات دما بر درصد تبدیل متان، درصد تبدیل اکسیژن و گزینش پذیری بررسی گردید. حل در دمای ۱۰۷۳ و ۱۱۲۳ درجه کلویین که واکنش بیشترین بازده را دارا می باشد، انجام شد.

کلمات کلیدی: اکسایش زوجی متان، مدلسازی، اتیلن، درصد تبدیل

۱- مقدمه

معمولاً در صنعت با استفاده از فرآیندهای تبدیل غیر مستقیم و تبدیل مستقیم متان میتوان محصولات با ارزش تولید کرد. فرآیندهایی که از روش غیر مستقیم استفاده می کنند مرحله اول یکسانی دارند و آن تولید گاز سنتز بعنوان محصول واکنش ریفرمینگ توسط بخار^۱ است که بشدت گرماگیر می باشد:



در این فرآیند از کاتالیست نیکل استفاده می شود. دما در حدود ۹۰۰ °C و فشار نزدیک به ۲۰ بار است. هیدروژن تولید شده از واکنش را می توان برای تولید آمونیاک استفاده نمود که آمونیاک مصرف عمده ای در صنایع تولید کود شیمیایی دارد. تحقیقات با هدف شناسایی فرآیندهای جدید برای تبدیل مستقیم متان و اجتناب از تولید گاز سنتز بعنوان محصول واسطه، عمدتاً از دهه هشتاد میلادی توسعه یافته است. فرآیندهای تبدیل مستقیم متان عبارتند از اکسیداسیون جزئی متان، زوج شدن حرارتی متان، فرآیندهای دیگری که به نام فرآیندهای BASF, Huls معروف هستند. فرآیند O.C.M بعنوان یکی از روشهای تبدیل مستقیم متان به محصولات با ارزشتر است و بعنوان یکی از فرآیندهایی که

قابلیت تجاری شدن را دارد مطرح می باشد. تحقیقات اولیه بر روی این فرآیند توسط کلر^۲ و بهزین^۳ در سال ۱۹۸۲ میلادی آغاز شده [۱] و توسط سایر محققین (برن^۴ ۱۹۸۳، هین سن^۵ ۱۹۸۴، چن^۶ و سایرین) پیگیری و توسعه یافته است. این فرآیند اغلب در فشار اتمسفریک و در محدوده دمایی ۹۰۰-۱۱۰۰ °C با استفاده از کاتالیستهای ترکیبات فلزات قلیایی و قلیایی خاکی صورت می گیرد. با ادامه تحقیقات بر روی این فرآیند، در چند سال اخیر مشخص شده است که با تغییر شرایط عملیاتی، فرآیند O.C.M می تواند در فاز گازی (در غیاب کاتالیست) نیز انجام شود که راندمان آن قابل مقایسه با فرآیند کاتالیستی است. [۱ و ۲].

۲- فرآیند اکسایش زوجی متان

اتیلن سبکترین هیدروکربن اولفینی است که بی رنگ و قابل اشتعال بوده، بوئی نسبتاً مطبوع دارد. وجود باند دو گانه در مولکول شرکت در واکنشهایی نظیر بسپارش^۷ و واکنشهای تولید هیدروکربنهای اشباع و مشتقات آنها را ممکن می سازد.

- 2 - Keller
- 3 - Bhasin
- 4 - Baern
- 5 - Hinsin
- 6 - Hinsin
- 7 - polimerization

1 - Steam Reforming





کننده ها، پوشش دهنده ها و ضدیخ و الکلها می باشند [۵]. در فرآیند اکسایش زوجی متان فرآیند متان و اکسیژن همزمان وارد سیستم واکنشی می شوند و واکنش در مجاورت کاتالیستهای جامد صورت می پذیرد. محصولات مطلوب این فرآیند اتیلن و اتان می باشند که در کنار آنها بمقدار جزئی استیلن و هیدروکربنهای سنگینتر نیز تولید می شود. در این فرآیند واکنشهای اکسیداسیون کامل و پیرولیز هم وجود دارند که منجر به تولید مقادیر قابل توجهی H_2O , H_2 , CO , CO_2 می گردند.

هندسه اتیلن نسبتاً ساده است و هر شش اتم در یک صفحه قرار دارند. اتیلن در آب و الکل بمقدار کم حل می شود و در اتر محلول است [۳].

در بین مواد شیمیایی آلی بیشترین حجم تولیدی مربوط به اتیلن است. این ماده عمدتاً توسط شکست مولکولی هیدروکربنها به کمک بخار آب تولید می شود. اتیلن مهمترین خوراک صنایع پتروشیمی است که می تواند به محصولات حد واسط بسیار زیادی تبدیل شود [۴] که از جمله آنها ترکیبات بسپارشی نظیر پلاستیکها، رزینها، الیاف مصنوعی، الاستومرها و نیز دیگر محصولات نظیر حلالها، نرم

جدول ۱ واکنشهای موجود در فرآیند OCM و ثوابت سینتیک هر واکنش مطابق با رابطه ارنیوس

شماره واکنش	واکنش	A	E_{oct}
1	$O_2 + 2^* = 2O^*$	2/6 E-3	-11/8
2	$CH_4 + O^* = CH_3 + OH^*$	1/9 E9	123/1
3	$C_2H_6 + O^* = C_2H_5 + OH^*$	1/4 E9	108/1
4	$C_2H_4 + O^* = C_2H_3 + OH^*$	1/4 E9	127/8
5	$2OH^* = H_2O + O^* + ^*$	6/9 E9	152/7
6	$CH_3 + O^* = CH_3O^*$	3/6 E6	0.00
7	$2CH_3O^* + 5O^* = 2CO_2 + 3H_2O + 7^*$	0.00	0.00
8	$CO + O^* = CO_2 + ^*$	1/9 E9	93/7
9	$CO_2 + ^* = CO_2^*$	5 E-5	-108/4
10	$4HO_2 = 3O_2 + 2H_2O$	1E-2	0.00

جذب هیدروژن از متان یک واکنش مطلوب محسوب می شود زیرا منجر به تشکیل رادیکال اتیل می گردد که رادیکال اتیل از طریق واکنشهای فاز گازی به اتیلن تبدیل می شود. در واکنش چهارم یک اتم هیدروژن از اتیلن گرفته شده است. قدرت باند C-H در اتیلن نسبت به متان 5 KJ/mol بیشتر است. با این حال انجام این واکنش امکانپذیر است. واکنش چهارم یک واکنش نامطلوب است زیرا منجر به تشکیل رادیکالهای وینیل می گردد که یک منبع مهم برای تشکیل منوکسیدکربن توسط واکنشهای فاز گازی می باشد. واکنش پنجم احیای سایت فعال را نشان می دهد که توام با آزاد شدن آب است. واکنشهای ۶ و ۷ تشکیل مستقیم دی اکسید کربن بر روی کاتالیست را نشان می دهد. واکنش ۷ ابتدائی نیست و شامل سلسله مرحله‌ای بر روی کاتالیست است که نهایتاً منجر به

در این تحقیق از مکانیزم های شیمیایی ارائه شده توسط ایل-رایدل که نسبت به مکانیزمهای دیگر متداولتر میباشد استفاده شده است. مراحل واکنشهای ابتدائی کاتالیستی که در این مدل برای کاتالیست Sn/Li/MgO در نظر گرفته شده، در جدول ۱ آمده است (واکنشهای ۱-۱۰) که مهمترین مرحله‌ای هستند که بر روی کاتالیست صورت میگیرند.

واکنش اول مربوط به فعال شدن اکسیژن از طریق جذب سطحی تفکیکی می باشد. در واکنش دوم هیدروژن مولکول متان توسط گونه های اکسیژنی که جذب سطحی شده اند جدا شده و رادیکال متیل تولید می شود. با توجه به اینکه کاتالیست توانسته است یک اتم هیدروژن از متان بگیرد پس میتواند اتم هیدروژن را از مولکول اتان هم بگیرد زیرا قدرت باند C-H در اتان نسبت به متان 20 KJ/mol کمتر است.

تشکیل CO_x میشود. در واکنش ۸، CO با استفاده از اکسیژن فعال سطحی به CO_2 تبدیل می شود. بررسیهای تجربی نشان می دهد که CO_2 اثر بسیار ممانعت کننده ای بر میزان تبدیل متان و اکسیژن دارد. این اثر ممکن است بدلیل تشکیل کربناتها بر روی سطح کاتالیست باشد که منجر به کاهش تعداد سایتهای فعال می گردد که اثر ممانعت کنندگی آن توسط واکنش شماره ۹ لحاظ شده است که CO_2^* نمایانگر یک کربنات است. واکنش ۱۰ محتمل ترین مرحله پایانی هتروژن روی سطح اکسید فلزی است که یک مرحله ابتدائی نمیباشد. پس بطور کلی واکنشهای ۴-۲ و واکنشهای شروع هتروژن هستند.

۲-۱ معادلات سرعت و پارامترهای سینتیکی

همانگونه که قبلا عنوان شد، کسری از سایتهای فعال کاتالیست توسط CO_2 اشغال گردیده است که جذب این گونه ها بر روی سایتهای فعال کاتالیست در رقابت با جذب مولکول متان می باشد و موجب ایجاد اثر ممانعت کنندگی برای تشکیل رادیکال متیل می گردد. بدلیل اثر ممانعت کنندگی اکسیژن و CO_2 برای عبارت سرعت این واکنشها از معادله هویگن- واتسون^۱ استفاده می شود. برای واکنش مرحله دوم و با فرض جذب سطحی رقابتی اکسیژن و CO_2 معادله سرعت بقرار زیر است:

$$r_2 = \frac{K_{O_2} e^{-\frac{E_{a,O_2}}{RT}} (K_{CO_2} e^{-\frac{\Delta H_{ad,O_2}}{RT}} P_{O_2})^{n_2} P_{CH_4}}{\left[1 + (K_{O_2} e^{-\frac{\Delta H_{ad,O_2}}{RT}} P_{O_2})^{n_1} + K_{J,CO_2} e^{-\frac{\Delta H_{ad,CO_2}}{RT}} P_{CO_2} \right]^2} \quad (2)$$

مشاهده می شود که سرعت واکنش تابع خطی از فشار جزئی متان است.

از آنجایی که برای سایر واکنشهای اکسیداسیون نظیر اکسیداسیون اتان اتیلن و منوکسید کربن اثر ممانعت کنندگی اکسیژن وجود ندارد از معادله ساده شده هویگن- واتسون استفاده میشود که تنها اثر ممانعت کنندگی دی اکسیدکربن را لحاظ کرده است:

$$r_j = \frac{K_{0,j} e^{-\frac{E_{aj}}{RT}} P_c^{m_j} P_{O_2}^{n_j}}{(1 + K_{J,CO_2} e^{-\frac{\Delta H_{ad,CO_2}}{RT}} P_{CO_2})^n} \quad (3)$$

1 -Hougen- Watson

مراحل ۶-۳، ۱، $j =$

برای واکنشهای دهیدروژناسیون حرارتی، ریفرمینگ توسط بخار اتیلن و واکنش شیفت آب- گاز از معادلات سرعت توانی استفاده شده است (معادلات ۴ الی ۷):

$$r_7 = K_{0,7} e^{-\frac{E_{a,7}}{RT}} P_{C_2H_6}^{n_7} \quad (4)$$

$$r_8 = K_{0,8} e^{-\frac{E_{a,8}}{RT}} P_{C_2H_4}^{m_3} P_{H_2O}^{n_8} \quad (5)$$

$$r_9 = K_{0,9} e^{-\frac{E_{a,9}}{RT}} P_{O_2}^{m_9} P_{H_2O}^{n_9} \quad (6)$$

$$r_{10} = K_{0,10} e^{-\frac{E_{a,10}}{RT}} P_{O_2}^{m_{10}} P_{H_2}^{n_{10}} \quad (7)$$

پارامترهای سینتیکی مورد استفاده در معادلات ۲ الی ۷ در مرجع [۸ و ۷] آمده است.

۲-۲ شرایط عملیاتی تاثیر گذار بر روی عملکرد

فرآیند OCM

مهمترین شرایط عملیاتی تاثیر گذار بر روی عملکرد فرآیند O.C.M را می توان بصورت زیر تقسیم نمود.

الف- فشار جزئی واکنشگرها:

افزایش فشار جزئی اکسیژن منجر به افزایش میزان تبدیل متان و کاهش گزینش پذیری محصولات مطلوب میگردد که این روند کلی برای همه کاتالیستها وجود دارد ولی میزان حساسیت به فشار جزئی اکسیژن بسته به نوع کاتالیست متفاوت است.

ب- اثر دما:

اثر دما در تمامی کاتالیستهای مورد بررسی یکسان است. با افزایش دما گزینش پذیری و راندمان محصولات مطلوب از





یک مقدار حداکثری عبور می نماید. دمایی که در آن گزینش پذیری محصولات مطلوب حداکثر است برای هر کاتالیست منحصر بفرد می باشد.

ج- اثر فشار کل:

فشار کل سیستم از اهمیت زیادی برخوردار است زیرا یک عامل مهم در تعیین اندازه راکتور و کار کمپرسورها در بخش جداسازی می باشد. با افزایش فشار اهمیت واکنشهای فاز گازی افزایش چشمگیری می یابد. همچنین افزایش فشار منجر به افزایش میزان تبدیل و اکنشگرهای اولیه می گردد ولی گزینش پذیری محصولات مطلوب تا حدودی کاهش می یابد.

۳- مدلسازی و نتایج

در این تحقیق برای تهیه مدل راکتور بستر ثابت فرآیند اکسایش زوجی متان و بررسی متغیرهای درصد تبدیل متان، اکسیژن، گزینش پذیری و بازده راکتور از نرم افزار فلوئنت استفاده شد. معادلات پیوستگی، اندازه حرکت و معادلات واکنشی همزمان حل گردید. حل ایزوترم انجام شد و نتایج آن با نتایج کد نوشته شده توسط نرم افزار مطلب مقایسه و صحت جوابها بررسی شد.

لازم به ذکر است که چون معادلات پیوستگی؛ اندازه حرکت؛ انتقال اجزاء؛ واکنشهای شیمیایی؛ اثرات محیط متخلخل بایستی به طور همزمان وکوپل حل شوند و بدلیل وجود تعداد زیاد اجزاء شیمیایی (۹ جزء شیمیایی در طول راکتور بایستی حل گردند، $CH_4, O_2, C_2H_4, C_2H_6, H_2O, H_2, CO_2, CO, N_2$)، فرایند حل طولانی است. با توجه به اینکه ۸ واکنش متفاوت درون راکتور انجام می شود و واکنشها از نوع Stiff هستند امکان حل معادلات به صورت جدا از هم وجود ندارد چرا که باعث واگرایی حل می گردد بنابراین از روش کوپل و متد حل معادلات Stiff در نرم افزار فلوئنت ۶/۱ استفاده شده است. برای کاهش زمان حل ابتدا معادلات پیوستگی اندازه حرکت انرژی اثرات محیط متخلخل، انتقال اجزا متان و اکسیژن را حل کرده پس از اطمینان از رسیدن به همگرایی لازم معادلات مربوط به واکنشها حل می گردند. حل هر حالت به طور متوسط با کامپیوتر Dual-Core AMD Opteron(tm) Processor 2400 ۷۵ ساعت طول می کشد در واقع مرحله اول که حل بدون واکنش می باشد ۱۸ ساعت و حل کامل پس از همگرایی مرحله اول ۵۸ ساعت به طول می انجامد. با توجه به کم بودن

تعداد هسته های پردازش و استفاده از روش پردازش موازی shred، تفاوت چندانی بین cpu time و زمان فیزیکی نبوده است. در واقع به دلیل کمبود ترافیک شبکه و المانهای استفاده شده، نزدیکی این دو زمان به هم قابل قبول است.

سه نوع مش با تعداد المانهای مختلف برای این مسئله حل شد و نتایج مسئله نسبت به تغییر مستقل بوده است. شرط همگرایی در مرحله اول هر حالت برابری دبی جرمی ورودی و خروجی و صفر بودن مجموع شارهای حرارتی ورودی و خروجی به محدوده حل می باشد. برای حل کامل نیز برابری دبی های ورودی و خروجی و ثابت ماندن حد اکثر دمای درون راکتور و دمای متوسط خروجی نسبت به تکرارهای متوالی شرط همگرایی حل است.

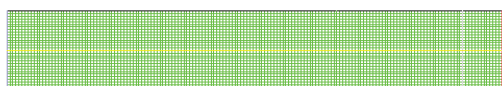
از انجا که راکتور مورد بررسی کوچک میباشد میتوان ثابت بودن دما در طول راکتور را فرض مناسبی دانست. دمای درون راکتور ثابت می باشد و در نواحی مختلف بستگی به نرخ واکنش و یا متغیرهای دیگر ندارد. جهت تاثیر دما بر راندمان راکتور، مدلسازی در دماهای ۱۰۷۳ و ۱۱۲۳ درجه کلوین (محدوده بیشترین بازده واکنش) انجام شد.

۳-۱ هندسه و المان بندی

مدل مساله لوله ای است به قطر ۲۹/۵ میلیمتر و طول ۱۶۵ میلیمتر که در نرم افزار gambit 2.0 به شکل نمایش داده شده در شکل ۱ مشبندی شده است. چون مساله از تقارن محوری برخوردار است بنابراین می توانیم مساله را به صورت متقارن حل کنیم.

از انجا که درون لوله از مواد کاتالیستی پر می شود و لازم است که محیط را متخلخل در نظر بگیریم، از اعمال المان بندی لایه مرزی بر روی دیواره خودداری می کنیم.

شکل ۱ هندسه راکتور با المانهای مربعی



۳-۲ شرایط مرزی

در این مدل چهار شرط مرزی داریم که عبارتند از: مرز ورودی جریان: برای این مرز از شرط Mass Flow Inlet استفاده می کنیم. در ضمن فرض شده است نسبت مولی متان به اکسیژن برابر ۴ بوده، دمای مخلوط ورودی برابر ۱۱۲۳ کلوین باشد. مرز خروجی جریان: برای خروجی جریان از شرط Pressure Outlet استفاده می کنیم بطوریکه جریان خروجی وارد محیط با فشار جو شود. دیواره: دیواره را عایق در نظر می گیریم این کار را با انتخاب شار حرارتی صفر بر روی دیواره اعمال می کنیم. محور تقارن: این مرز را به عنوان Axis تعریف می کنیم.

۳-۳ خواص مواد و واکنشها

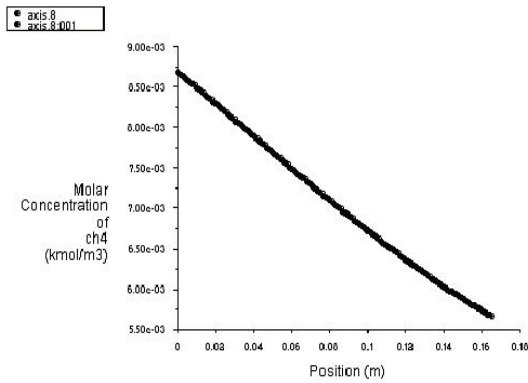
برای مقادیر گرانی، ظرفیت گرمایی ویژه و... از رابطه میانگین خواص مخلوط گازها استفاده شده است و برای چگالی از رابطه گاز ایده ال استفاده گردید. واکنشهای موجود چنانکه در جدول ۱ مشاهده می شود شامل هشت واکنش یک طرفه است و همانگونه که در بخش معادلات توضیح داده شد برای هر واکنش لازم است که ضرایب ثابت نرخ آرنیوس مطابق با داده های ارائه شده در جدول ۱ وارد گردد. برای محیط متخلخل نیز ضرایب تعریف شده در بخش معادلات حاکم بایستی وارد نرم افزار شود در ضمن خواص فیزیکی محیط متخلخل در قسمت مواد با استفاده از خواص کاتالیست معین شده اند

۴- نتایج مدلسازی

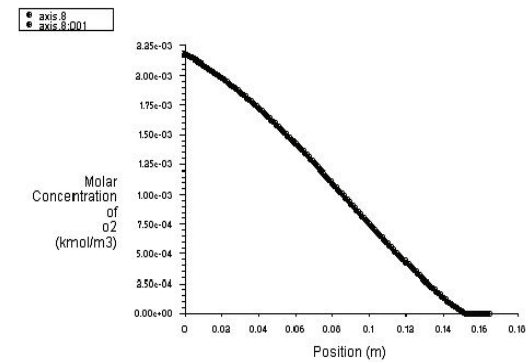
با توجه به اینکه حل معادلات به صورت همدمای است، دما به میزان ۱۱۲۳ کلوین فرض شده بود و در نمودارهای مرتبط با نحوه تولید یا مصرف اجزاء بر اساس طول راکتور، رسم شده است. توجه به این نکته ضروری است که مقدار دما در نحوه تغییر پارامترهای مورد بررسی در این نمودارها موثر میباشد. اکسیژن و متان در حضور کاتالیست بر اساس نرخهای تعریف شده واکنش می دهند و در طول راکتور متان و اکسیژن مصرف می شوند، بطوریکه برای حالت دمای ۱۱۲۳ کلوین، تمام اکسیژن قبل از انتهای راکتور مصرف می شود. اگر به شکل ۴ و شکل ۵ دقت کنیم، متوجه می شویم که اتان در ابتدای راکتور تولید میشود و سپس به یک مقدار ثابت رسیده، دوباره مقدار آن کمی کاهش می یابد در حالیکه

اتیلن همواره در حال تولید است و مقدار آن در انتهای راکتور به بیشترین مقدار خود می رسد. چرا که اتان پس از تولید با اکسیژن واکنش داده، به اتیلن و بخار آب تبدیل می شود بنابراین اتان کاهش و اتیلن افزایش می یابد. این موضوع در نمودار نرخهای واکنش در شکلهای ۱۰، ۱۱ و ۱۲ مشاهده می شود. واکنش اول و دوم نسبت به بقیه واکنشها از شدت بیشتری برخوردار هستند واکنش اول در طول راکتور به خاطر کاهش اکسیژن و متان کاهش می یابد ولی واکنش دوم به خاطر افزایش اتان تولیدی که واکنشگر واکنش دوم است، افزایش می یابد. بقیه واکنشها از درجه اهمیت کمتری برخوردار هستند و چون بعضی از واکنشگرها خود جزو محصولات واکنش دیگر هستند واکنشها نیز به صورت کوپل عمل می کنند.

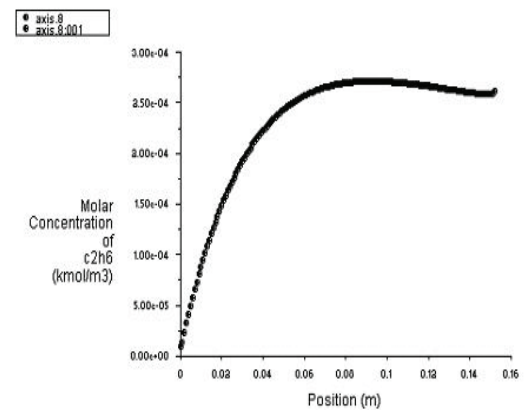




شکل ۲ تغییرات غلظت مولی متان در طول راکتور

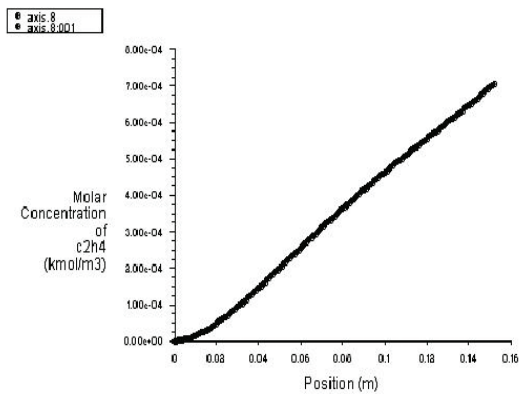


شکل ۳ تغییرات غلظت مولی اکسیژن در طول راکتور

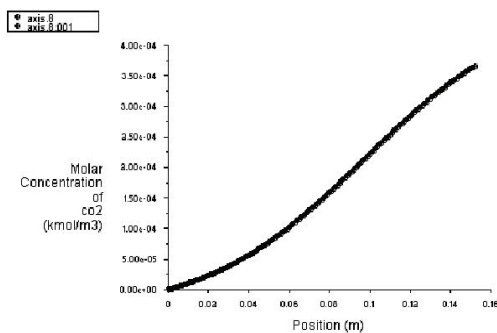


شکل ۴ تغییرات غلظت مولی اتان در طول راکتور

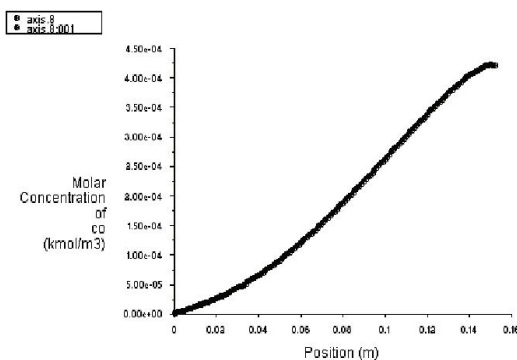




شکل ۵ تغییرات غلظت مولی اتیلن در طول راکتور

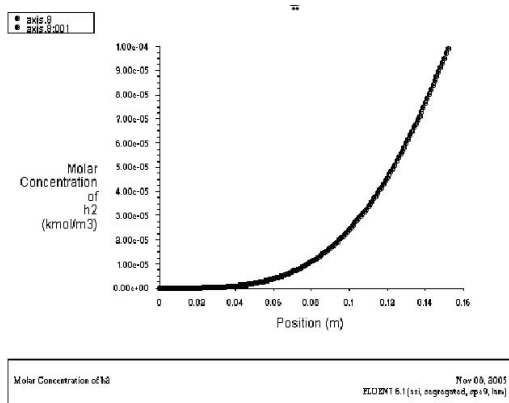


شکل ۶ تغییرات غلظت مولی دی اکسید کربن در طول

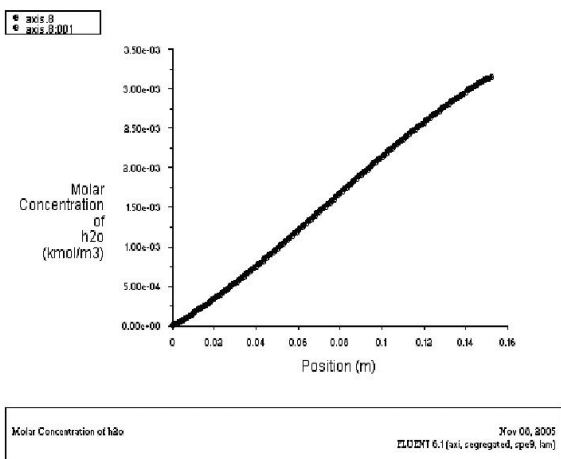


شکل ۷ تغییرات غلظت مولی منو اکسید کربن در طول راکتور

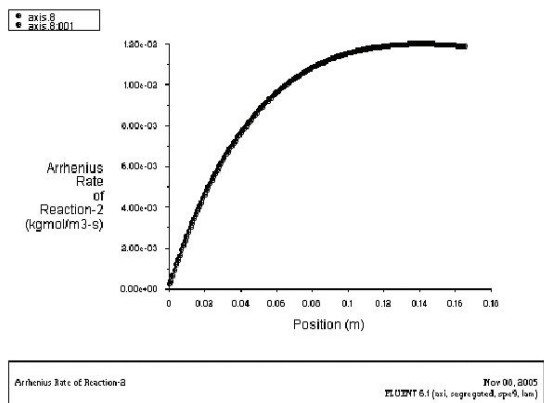




شکل ۸ تغییرات غلظت مولی هیدروژن در طول راکتور

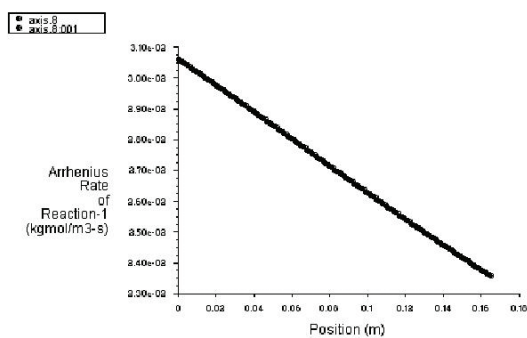


شکل ۹ تغییرات غلظت مولی بخار آب در طول راکتور



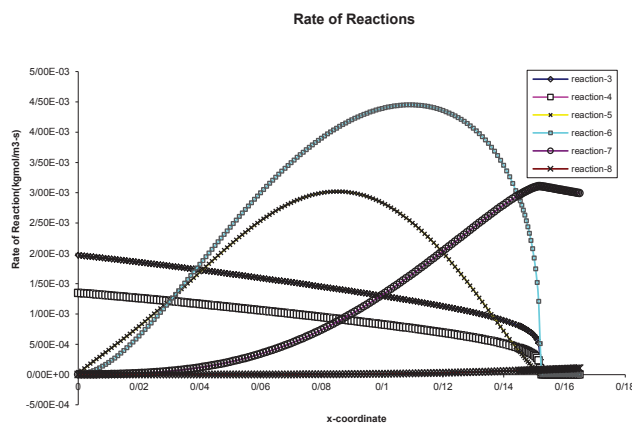
شکل ۱۰ تغییرات نرخ واکنش دوم در طول راکتور





شکل ۱۱ تغییرات نرخ واکنش اول در طول راکتور

Arrhenius Rate of Reaction-1
 2.30E-02 3.10E-02
 0 0.02 0.04 0.06 0.08 0.1 0.12 0.14 0.16 0.18
 Position (m)



شکل ۱۲ نرخ واکنشهای سوم الی هشتم گزارش شده در جدول ۱

برای اطمینان از صحت جوابهای بدست آمده، نتایج با کد پذیري و بازده راکتور در دو حالت مقایسه شدند، که نتایج نوشته شده توسط نرم افزار مطلب مقایسه گردید. در این بررسی متغیرهای درصد تبدیل متان ، اکسیژن ، گزینش

جدول ۲ نسبت مولی متان به اکسیژن برابر ۴ و دمای راکتور برابر ۱۱۲۳ درجه کلوین

خطا	کد نوشته شده	نرم افزار Fluent	
۴/۴ %	۳۱/۶۵	۳۳/۱۴	درصد تبدیل متان
۰/۱۰ %	۱۰۰	۱۰۰	درصد تبدیل اکسیژن
۰/۰۴ %	۷۱/۰۷	۷۱/۰۴	گزینش پذیری
۴/۴ %	۲۲/۵	۲۳/۵۴	بازده

جدول ۳ نسبت مولی متان به اکسیژن برابر ۱۶ و دمای راکتور برابر ۱۰۷۳ درجه کلون

خطا (fluent - Code) Fluent*100	کد نوشته شده	نرم افزار Fluent	
۴/۷ %	۱۱/۶۹	۱۲/۲۷	درصد تبدیل متان
۰/۱۰ %	۱۰۰	۱۰۰	درصد تبدیل اکسیژن
۰/۴۲ %	۸۷/۳۲	۸۷/۷۶	گزینش پذیری
۵/۰۵ %	۱۰/۲۲	۱۰/۷۶	بازده

31,2748-2753.

[4] - Keller,G.E. and Bhasin.M.M. ,”Synthesis of Ethylene via Oxidative Coupling of Methane., J.Catal., 1982,73,9-19.

[5]- Baerns ,M.,”Basic Solids as Catalysts for the oxidative Coupling of Methane”.

Chapter 11 in Methane Conversion by Oxidative Process(Wolf,E.E.,ed.)Van Nostrand Reinhold, New York,1992,382-402.

[6]-Dautzenberg, F.M; Schlatter. J.C.; Fox, J.M.; Rostrup - Nielsen, J.R . and Chirstansen., “Catalysts and Reactor Requirement for the Oxidative Coupling of Methane.”, Catal Today, 1992,13,503-509.

[7] - Stan,Z.; Mleczko.L. and Baerns,M. ,” Comrehensive kinetics of Oxidative Coup - ling of Methane over the La2o3/Cao Catalyst”,Ind. Eng.Chem.Res.,1997,36,2568-2579.

[8]-Couwenberg,P.M.:Chen,Q.and Marin,G.B., Kinetic of a Gas-phase chain Reaction catalysts., Ind.Eng.Chem.Res.,1996,35,3999-4011.

۵- نتیجه گیری

با توجه به اینکه واکنش های فرآیند OCM فوق العاده گرمازا می باشد، مدلسازی راکتور این واکنش بسیار مهم می باشد. بوسیله این مدلسازی رفتار های مختلف راکتور در هر نقطه معین گردید که برای افزایش مقیاس این فرآیند بسیار مورد نیاز بود.

در این مقاله یک راکتور لوله ایی که واکنش اکسیداسیون جزئی متان در آن صورت می گرفت با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی به صورت مدل دو بعدی انجام و نشان داده شد که با استفاده از CFD میتوان با دقت بسیار بالای روند مصرف و تولید اجزاء ورودی و تولیدی به راکتور را در طول راکتور رصد کرد. طوریکه میتوان بهترین طول راکتور برای میزان تولید مورد نظر از اتیلن به ازای مقدار مشخصی از متان تخمین زد.

همانگونه که مشاهده می شود نتایج از دقت مطلوبی برخوردارند.

مراجع:

[1]-Keller,G.E. and Bhasin.M.M. ,”Synthesis of Ethylene via Oxidative Coupling of Methane., J.Catal., 1982,73,9-19.

[2]-Baerns ,M.,”Basic Solids as Catalysts for the oxidative Coupling of Methane”. Chapter 11 in Methane Conversion by Oxidative Process (Wolf,E.E.,ed.)Van Nostrand Reinhold, New York,1992,382-402

[3]- Billad F.G; Gueret, C.P. and Baronnet.F., ”Thermal Coupling of Metthane in tubular Flow Reactor:Experimental Setup and Influence of Temperature” ,Ind. Eng. Res., 1992,



The Modeling of the Oxidative Coupling of Methane

M.Zarkesh, H.Brijanian, N.R.Rasouli, F.Joda

Abstract

In the conventional view, since we are not able to express the system degrees of freedom variations at different locations, there exists no option, other than doing experiments, to access the relations among the system ruling parameters. Experimental correlations so obtained are valid, only within the boundaries of measured parameters, hence cannot over all requirements.

Using the computational fluid dynamics (CFD), the degrees of freedom variations at all locations and all times are accessible. This ability results from the simultaneous solution of the continuity equations, applied on small region of the system. In this investigation, the oxidative coupling of Methane modeling, which is one of the direct methane conversion processes, is studied.

The desirable product of this process is Ethylene. By simultaneous solution of reaction equations, using the FLUENT software, the temperature effects on the Methane percent conversion, the Oxygen percent conversion and the reaction selectivity were investigated. The aforementioned solution was fulfilled at 1073 and 1123 degrees of Kelvin, which have maximum reaction efficiencies.

Keywords: Oxidating coupling of Methane, Modeling, Ethylene, conversion percent

