

شبیه‌سازی دینامیکی و بررسی تغییرات پارامترهای عملیاتی بر میزان گوگرد تولیدی در واحد SRU مطالعه موردی پالایشگاه یکم مجتمع گاز پارس جنوبی

علیرضا شهسواری^۱، علیرضا بینایی^۲، محمدرضا سردشتی بیرجندی^۳، فرهاد شهرکی^۴، جعفر صادقی^۵

۱. دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی شهید نیکبخت، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان، ایران
۲. فارغ‌التحصیل کارشناسی ارشد، گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی شهید نیکبخت، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان، ایران
۳. استادیار، گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی شهید نیکبخت، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان، ایران
۴. استاد، گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی شهید نیکبخت، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان، ایران
۵. دانشیار، گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی شهید نیکبخت، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان، ایران

آدرس پست الکترونیک نویسنده مسئول مکاتبات: m.r_sardashti@eng.usb.ac.ir

مقاله علمی - کاربردی

صفحه ۵۷ - ۷۵

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۱/۰۶/۱۶

تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۰۳/۱۰

چکیده

گوگرد یکی از مهم‌ترین محصولات جانبی فرآوری نفت و گاز است که در صنایع مهمی همچون تولید اسیدسولفوریک و صنایع کشاورزی کاربرد دارد. از این رو بهبود راندمان فرآیندهای تولید گوگرد در مقیاس صنعتی توجه فراوانی را به خود اختصاص داده است. به دلیل وجود برخی از مشکلات فرآیندی از جمله وجود ترکیبات سنگین آروماتیک و دمای نامناسب فرآیند و وجود CO₂، راندمان این واحد کاهش می‌یابد. بنابراین در این مقاله به شبیه‌سازی پایای فرآیند کلاوس اصلاح‌شده واحد بازیافت گوگرد پالایشگاه یکم مجتمع گاز پارس جنوبی با استفاده از نرم‌افزار Aspen Plus پرداخته شده است. همچنین به بررسی دینامیکی پارامترهای غلظت CO₂ و دمای کوره بر میزان گوگرد تولیدی فرآیند پرداخته می‌شود. نتایج نشان می‌دهد دقت شبیه‌سازی در حالت پایا و دینامیک مطلوب بوده به طوری که میانگین خطا برای اطلاعات جریان‌های شبیه‌سازی در مقایسه با داده‌های صنعتی، برای حالت پایا و دینامیک به ترتیب ۲/۵۵ درصد و ۲/۱۱ درصد است. همچنین نتایج نشان می‌دهد که افزایش ۵۰ درصدی دمای کوره باعث افزایش دو برابری میزان گوگرد تولیدی و افزایش ۵۰ درصدی غلظت CO₂ باعث کاهش ۴ درصدی میزان گوگرد تولیدی می‌گردد.

کلیدواژه‌ها: بازیافت گوگرد، فرآیند کلاوس اصلاح‌شده، شبیه‌سازی پایا و دینامیکی، نرم‌افزار Aspen، تغییر پارامترهای عملیاتی

۱. مقدمه

در گاز استحصال از منابع نفت و گاز و پتروشیمی مقدار زیادی گاز سولفید هیدروژن وجود دارد. این ترکیب بسیار خورنده به تجهیزات انتقال آسیب می‌رساند در نتیجه تبدیل آن به گوگرد بسیار مهم است. بنابراین از فرآیندهای مهم موجود در صنایع پالایشگاهی، فرآیند بازیابی گوگرد از گاز اسیدی است. علاوه بر این گوگرد به‌عنوان یکی از مهم‌ترین محصولات جانبی فرآوری نفت و گاز، در صنایع مهمی همچون تولید اسیدسولفوریک و صنایع کشاورزی کاربرد زیادی دارد.





از این رو بهبود راندمان فرآیندهای تولید گوگرد در مقیاس صنعتی توجه فراوانی را به خود اختصاص داده است [۱]. واحد تولید گوگرد شامل بخش‌های مختلفی است که به شرح زیر است [۲]:

- بخش کلاوس^۱: در این بخش تمامی گاز اسیدی ارسالی از واحد آمین و گاز ترش از واحد آب‌ترش تصفیه می‌شود
- بخش تصفیه (TGT) TAIL GAS
- بخش گاز زدایی از سولفور مایع
- بخش کوره شکست حرارتی: این بخش از مهم‌ترین بخش‌های واحد تولید گوگرد است که تمامی واکنش‌های شکست در آن انجام می‌شود. واکنش‌هایی که در کوره انجام می‌گیرد واکنش‌های احتراقی و به دنبال آن واکنش‌های تعادلی در دمای بالا است.
- کوره شکست حرارتی از سه بخش اصلی انتقال حرارت جابه‌جایی، انتقال حرارت تشعشعی و خطوط مبدل‌های انتقال حرارت تشکیل شده است.

در فرآیند بازیافت گوگرد با وجود بازدهی مناسب به دلیل برخی از مشکلات فرایندی، فرآورده‌های نهایی و همچنین راندمان آن‌ها از کیفیت و کمیت مناسبی برخوردار نمی‌باشند. وجود ناخالصی‌های فراوان در گاز اسیدی، استفاده از کاتالیزورهای نامرغوب، حضور ترکیبات سنگین آروماتیک و همچنین دمای نامناسب فرآیند از جمله مشکلاتی است که به کاهش راندمان این واحد منجر می‌شوند که می‌تواند منجر به غیرفعال شدن کاتالیست‌های موجود در بسترهای کاتالیستی شود. به‌عنوان مثال درصد تبدیل گوگرد در واحد بازیافت گوگرد از نوع فرآیند کلاوس معمولاً بین ۹۵ تا ۹۸ درصد تغییر می‌کند اما میزان بازدهی برخی از واحدهای مذکور در پالایشگاه‌های داخلی به دلیل همین مشکلات عملیاتی ممکن است تا کمتر از ۸۵ درصد نیز کاهش یابد [۲].

با توجه به اینکه واحدهای صنعتی هیچ‌کدام عملاً در شرایط پایا نیست و همچنین با تغییر شرایط عملیاتی و بروز اغتشاشات به علت مشکلاتی که بالا ذکر گردید باید کیفیت محصولات خود را حفظ کنند، مؤثرترین روش برای بررسی این تغییرات استفاده از شبیه‌سازی دینامیکی فرآیند است. در شبیه‌سازی دینامیکی، هم‌زمان با طراحی، اثر پارامترهای مختلف در نظر گرفته می‌شود و در صورت نیاز کنترل می‌گردد. بنابراین این تحقیق ابتدا به شبیه‌سازی پایای فرآیند کلاوس

اصلاح‌شده واحد بازیافت گوگرد پالایشگاه یکم مجتمع گاز پارس جنوبی با استفاده از نرم‌افزار Aspen Plus پرداخته، سپس به بررسی دینامیکی پارامترهای غلظت CO_2 و دمای کوره بر میزان گوگرد تولیدی فرایند با نرم‌افزار Aspen Dynamic پرداخته است.

مرور و بررسی تحقیق‌های گذشته:

رضازاده فیض‌آبادی به رفع مشکل واحدهای بازیافت گوگرد پالایشگاه گاز شهید هاشمی نژاد پرداخته است که دمای پایین کوره‌های واکنش، سبب ناقص سوزی هیدروکربورها و از بین رفتن سریع فعالیت کاتالیست‌های بستر کاتالیستی مرحله اول می‌شوند و به بررسی امکان جذب B.T.E.X (بنزن، تولوئن، اتیل بنزن و زایلن) از گازهای اسیدی ورودی به واحدهای بازیافت گوگرد پرداخته است [۴].

جوادى نسب ضمن ارائه شرح فرآیند بازیافت گوگرد به روش کلاوس، با بررسی سینتیک واکنش‌ها، شبیه‌سازی واحد را توسط نرم‌افزار Aspen با استفاده از داده‌های واحد بازیافت گوگرد فاز ۴ و ۵ پارس جنوبی که توسط شرکت لورگی ارائه شده، انجام داده است. در نهایت سازگاری و همخوانی قابل قبولی میان نتایج به‌دست‌آمده از شبیه‌سازی و داده‌های موجود و همچنین نتایج شبیه‌ساز Sulsim مشاهده کرده است. با شبیه‌سازی واحد، امکان شناسایی متغیرهای تأثیرگذار را فراهم کرده است. پس از شناسایی این متغیرها با بیشینه‌سازی مقدار بازیافت گوگرد در کل واحد، مقادیر بهینه متغیرهای موردنظر به‌منظور به‌کارگیری در فرآیند به‌دست‌آمده است. پس از آنالیز حساسیت روی متغیرهای عملیاتی، به‌منظور بهینه‌سازی واحد از الگوریتم ژنتیک استفاده کرده است و مقدار بهینه متغیرهای عملیاتی را به دست آورده است [۵].

پهلوان و همکاران به مدل‌سازی و شبیه‌سازی کوره واکنش با استفاده از نرم‌افزار پرومکس پرداختند. در این مطالعه کوره واکنش با یک مدل سینتیکی شبیه‌سازی شده است. دما و غلظت خروجی پیش‌بینی شده توسط این مدل با داده‌های تجربی منتشر شده در داده‌های به‌دست‌آمده از شبیه‌ساز پرومکس مقایسه شده است. مدل جنبشی که در این مقاله مورد استفاده قرار می‌گیرد دارای دو ویژگی مهم است. اولاً این یک مدل توزیع شده است و می‌تواند برای به دست آوردن پروفیل‌های دما و غلظت درون کوره استفاده می‌شود. ثانیاً این مدل پویا است و می‌تواند برای تجزیه و تحلیل رفتار گذرا و طراحی سیستم کنترل استفاده شود [۶].

1. Claus

ایرانمنش و همکاران به بررسی دمای کوره و تأثیر آن بر میزان بازیافت گوگرد در واحدهای بازیافت گوگرد با استفاده از نرم‌افزار شبیه‌ساز پرومکس پرداختند. آن‌ها دریافتند که اگر دمای کوره زیر ۹۵۰ درجه سانتی‌گراد باشد ترکیبات BTEX (بنزن، تولوئن، اتیل بنزن و زایلن) به‌طور کامل نمی‌سوزند و بر روی بسترهای کاتالیستی نشسته و باعث افت راندمان می‌شوند [۳].

عبدلی و همکاران به بررسی اثر غلظت هیدروژن سولفید بر میزان بازیافت گوگرد و دمای احتراق کوره واحد بازیافت گوگرد پالایشگاه نفت آبادان پرداختند. آن‌ها در این مقاله فرآیند احتراق در کوره واکنش پالایشگاه مذکور شبیه‌سازی و نتایج با داده‌های تجربی بررسی نمودند. سپس روش بهینه‌سازی افزایش نسبت مولی هیدروژن سولفید موجود در ورودی برای سه حالت ۸۱، ۸۴ و ۸۷ درصدی شبیه‌سازی شده است. شبیه‌سازی‌ها با استفاده از نرم‌افزار فلوئنت انجام شده است [۷].

مریم سعید و همکاران یک مدل ریاضی برای راکتور کاتالیستی با استفاده از نرم‌افزار متلب ارائه و از یک مدل سینتیکی برای واکنش هیدرولیز دو ترکیب CS_2 و COS جهت برآورد تغییرات درصد تبدیل و غلظت محصولات در طول بستر استفاده نمودند [۸].

ادیمی و همکاران از کنترل‌کننده نرو-فازی به‌منظور کنترل سرعت واکنش در بستر کاتالیستی فرآیند کلاوس استفاده کردند. همچنین با استفاده از نرم‌افزار متلب شبیه‌سازی فرآیند را انجام دادند و مقایسه‌ای میان نتایج حاصل از کنترل‌کننده پیشنهادی نرو-فازی و کنترل‌کننده کلاسیک نمودند [۹].

پهلوان به مدل‌سازی دینامیکی کوره‌ی واکنش، دیگ بازیافت حرارتی، بسترهای کاتالیستی و چگالنده‌های واحد بازیافت گوگرد پرداخته است و برنامه‌ی مربوط به هر یک از آن‌ها را توسط نرم‌افزار متلب نوشته است. کوره‌ی واکنش مهم‌ترین بخش واحد بازیافت گوگرد است از این‌رو تمرکز بیشتری بر آن شده است و در این تحقیق مدل سینتیکی شامل چهارده واکنش از مهم‌ترین واکنش‌های کوره است [۱۰].

جعفری نژاد مقدمه‌ای مهم و مفصل برای کنترل و ترمیم ترکیبات گوگرد به‌ویژه اکسید انتشار شده از صنعت نفت می‌دهد. شروع با بخش‌ها، منابع اصلی و نوع عملیاتی است که گاز SO_x گوگرد منتشرشده را تولید می‌کند حداکثر مقدار خارج‌شده آن‌ها از صنعت نفت، کم کردن، کنترل، پیشگیری و

ترمیم روش‌های این انتشار از صنعت نفت است. در میان این روش‌ها واحد بازیابی گوگرد که اغلب شامل یک فرآیند کلاوس برای حذف توده گوگرد و سپس متعاقباً ترمیم یک واحد تصفیه گاز باقی‌مانده برای حذف H_2S باقی‌مانده و سوخت گاز در جزئیات مورد بحث قرار گرفته است [۱۱].

حجازی به شبیه‌سازی واحد بازیافت گوگرد پالایشگاه آبادان با بررسی سینتیک واکنش‌ها و با استفاده از داده‌های واحد مذکور با نرم‌افزار Aspen Plus پرداخته است. نتایج شبیه‌سازی پایا واحد با داده‌های فرآیندی مورد مقایسه قرار گرفت و خطای شبیه‌سازی برای گوگرد تولیدی در واحد ۲ درصد به دست آمد و سپس با استفاده از نرم‌افزار minitab مدل ریاضی ارائه گردیده است که به کمک آن بتوان عوامل مؤثر بر راندمان این واحد را شناسایی کرد [۱۲].

سمانه زارعی و همکاران مدل‌سازی و بهینه‌سازی کوره واکنش واحد بازیافت گوگرد پالایشگاه‌های گازی را با ارائه یک شبکه واکنش جهت مدل‌سازی سینتیکی و نهایتاً بهینه‌سازی کوره واکنش با استفاده از نرم‌افزار متلب انجام دادند [۱۳].

عبدلی و همکاران توانستند ابتدا به شبیه‌سازی و بررسی پارامترهای فرآیندی واحد بازیافت گوگرد پالایشگاه نفت آبادان و اعتبار سنجی داده‌های عددی با داده‌های تجربی بپردازند. سپس پارامتر پیش گرم کردن خط ورودی هوا و گاز سولفید هیدروژن به‌صورت هم‌زمان بر روی میزان افزایش تولید گوگرد در خروجی و افزایش دمای احتراق کوره واکنش مورد بحث قرار دادند. شبیه‌سازی تحقیق آن‌ها با استفاده از نرم‌افزار فلوئنت انجام شده است [۱۴].

اسفندیاری و همکاران با ارائه روشی جهت بهبود شبیه‌سازی واحد بازیافت گوگرد توسط نرم‌افزار پرومکس در حضور ترکیبات سنگین آروماتیک پرداختند. آن‌ها ضمن شبیه‌سازی واحد بازیافت گوگرد پالایشگاه گاز خانگیران، کاستی‌های نرم‌افزار پرومکس در حضور ترکیبات سنگین آروماتیک بررسی و راه‌کارهایی جهت بهبود شبیه‌سازی‌های صورت گرفته ارائه نمودند [۱۵].

عبدلی به شبیه‌سازی واحد بازیافت گوگرد پالایشگاه نفت آبادان به همراه بررسی اثر افزایش مقدار هوادهی ورودی بر میزان بازیافت گوگرد و دمای کوره واحد مذکور با نرم‌افزار فلوئنت پرداخته است. فرآیند احتراق در کوره واکنش پالایشگاه مذکور شبیه‌سازی و نتایج با داده‌های تجربی مقایسه شده‌اند، سپس روش بهینه‌سازی افزایش دبی هوای ورودی برای سه حالت افزایش ۵، ۱۰ و ۲۰ درصدی با نرم‌افزار فلوئنت





شبيه‌سازی شده است [۱۶].

اقبال احمدی چارچوبی کلی برای توسعه مدل شبيه‌سازی واحد برای فرآیند کلاوس اصلاح شده بر اساس ارزیابی داده‌ها و برآورد پارامترها با استفاده از الگوریتم ژنتیک ارائه داده است. او از نرم‌افزار هایسیس به‌عنوان یک شبيه‌ساز فرآیندهای تجاری که از سطح دقت بالا برخوردار است استفاده کرده است. ساخت یک چارچوب ارتباطی بین هایسیس و متلب، داده‌های پیش فرآیندی از داده‌های خام اندازه‌گیری و سپس تطبیق داده‌ها و ارزیابی هم‌زمان پارامترها تشخیص خطای ناخالص در الگوریتم پیشنهادی انجام شد [۱۷].

صادقی و همکاران شبيه‌سازی و بهینه‌سازی راکتورهای کاتالیستی واحد بازیافت گوگرد را با استفاده از نرم‌افزار اسپن انجام دادند. آن‌ها در این مطالعه از بسته جامد Aspen برای شبيه‌سازی و بهینه‌سازی دمای مبدل‌های کلاوس در یک واحد بازیافت گوگرد صنعتی استفاده کردند. در ابتدا برای اثبات صحت شبيه‌ساز، تبدیل هیدروژن سولفید و میزان تولید گوگرد که توسط Aspen محاسبه می‌شود را با داده‌های صنعتی مقایسه کردند [۱۸].

زارعی و همکاران در این مطالعه کوره واکنش فرآیند کلاوس با استفاده از روش حداقل اثرژی آزاد گیبس که شامل پارامترهای جدید در همبستگی خواص ترمودینامیکی است را با استفاده از نرم‌افزار متلب مدل کردند. مدل سینتیکی برای دیگ بازیافت حرارت می‌تواند داده‌های آزمایشی منطقی را پیش‌بینی کند [۱۹].

۲. فرآیند کلاوس

از مهم‌ترین فرآیندهای مورد استفاده در دنیا برای تبدیل H_2S به گوگرد عنصری فرآیند کلاوس اصلاح شده است [۳]. اولین بار در سال ۱۸۸۳ میلادی، روش کلاوس در تولید گوگرد توسط شیمیدان انگلیسی به نام فردریچ کلاوس^۱ پایه‌گذاری گردید. واکنش اصلی کلاوس بر پایه اکسیداسیون هیدروژن با هوا (اکسیژن) در حضور کاتالیزیت (بوکسیت) در یک راکتور یک مرحله‌ای است. محصولات این واکنش همان‌طور که در معادله ۱ مشاهده می‌شود، گوگرد عنصری و آب است.



$$\Delta H@77F = -135200 \text{ Btu}$$

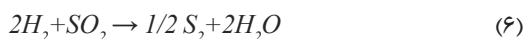
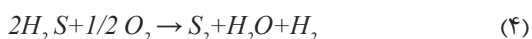
کنترل واکنش که به‌شدت گرمازا است، مشکل بود و بازده

بازیافت گوگرد در محدوده ۹۰-۸۰ درصد قرار می‌گرفت. اولین اصلاحات فرآیند کلاوس بهبودیافته در دهه‌ی ۱۹۳۰ میلادی توسط شرکت آلمانی از تغییرات در فرآیند اولیه حاصل گردید. نخست در کوره واکنش یک‌سوم سولفید هیدروژن سوزانده شده تا دی‌اکسید گوگرد تشکیل شود، علاوه بر این در این مرحله بخشی از سولفید هیدروژن به گوگرد عنصری تبدیل می‌گردد. سپس گازهای باقی‌مانده با دوسوم سولفید هیدروژن در یک راکتور کاتالیستی ترکیب‌شده تا گوگرد تشکیل شود، بنابراین نخست اکسیژن هوا با یک‌سوم سولفید هیدروژن طبق معادله ۲ در کوره واکنش می‌دهد.



$$\Delta H = -560 \text{ (Kj/mol)}$$

واکنش‌های ۳ الی ۶، در کوره واکنش بخشی از سولفید هیدروژن را به گوگرد عنصری تبدیل می‌کنند. این گوگرد در اولین چگالنده از جریان گازی جدا می‌شوند.

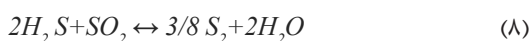


اکنون گازهای باقی‌مانده با دوسوم سولفید هیدروژن در راکتور اول واکنش داده و گوگرد عنصری تولید می‌شود. واکنش به‌صورت زیر است:



$$\Delta H = +47 \text{ (kJ/mol)}$$

سولفید هیدروژن و دی‌اکسید گوگرد باقی‌مانده در جریان گاز، مطابق واکنش ۸ در راکتورهای بعدی در دمای پایین‌تری واکنش می‌دهد.



$$\Delta H = -108 \text{ (kJ/mol)}$$

سرعت یک واکنش شیمیایی، شامل دو یا چند واکنش‌دهنده، با اضافه کردن ماده‌ای به نام کاتالیزور بهبود می‌یابد. برخلاف دیگر مواد موجود در واکنش‌های شیمیایی، کاتالیزورها مصرف نمی‌شوند. با استفاده از کاتالیست در واکنش

1. Friedrich Claus

شیمیایی انرژی رسیدن به حالت گذرا یا به عبارت دیگر انرژی فعال سازی کاهش می یابد، اما کل انرژی آزاد شده یا مصرف شده در واکنش تغییری نمی کند. در یک واکنش شیمیایی برای تبدیل مطلوب واکنش دهنده ها به محصولات بدون حضور کاتالیست، دمای بالایی مورد نیاز است، اما اگر واکنش در حضور یک کاتالیست انجام شود، انرژی اولیه مورد نیاز برای شروع کاهش یافته و در نتیجه هزینه تجهیزات و انرژی نیز کاهش خواهد یافت. علاوه بر این، نوع کاتالیزورهای انتخابی نیز بسیار اهمیت دارند، زیرا بازده تولید گوگرد در واحد بازیابی گوگرد به میزان قابل توجهی به فعالیت و واکنش پذیری کاتالیزورهای مورد استفاده در این فرآیند بستگی دارد. همچنین یکی از مشکلات عمده مربوط به عملیات کاتالیزورهای هتروژن، کاهش و از دست رفتن فعالیت کاتالیست هم زمان با برقراری جریان خوراک است. این مشکل، غیرفعال شدن کاتالیست نامیده می شود. این فرآیند که دارای ماهیتی شیمیایی و فیزیکی است هم زمان با واکنش اصلی اتفاق می افتد. غیرفعال شدن اجتناب ناپذیر است اما می توان سرعت آن را کاهش داد یا حتی مانع از آن شد و از برخی اثرات و عواقب آن اجتناب کرد. با توجه به شناخت اهمیت استفاده از کاتالیست و مؤثر بودن نوع کاتالیزورهای انتخابی لازم است کاتالیزورهای استفاده شده برای این فرآیند، شناسایی شده و انتخاب آن، با توجه به مؤثر و پایدار بودن کاتالیست انجام گردد. همچنین با توجه به این که فعالیت کاتالیزورهای این واحد در حین عملیات کاهش می یابد تا اینکه در نهایت در طی یک مدت زمان مشخص غیرفعال می شود پیش بینی عملکرد کاتالیست فرآیند کلاوس یک مسئله مهم برای کمک به شرکتها و پالایشگاهها در انتخاب کاتالیست مناسب و عیب یابی واحد گوگرد است، بنابراین در مجموع فرآیندهای بازیافت گوگرد توسط روش کلاوس شامل مراحل عملیاتی زیر است [۳]:

• احتراق

یعنی سوزاندن هیدروکربورها و دیگر مواد قابل احتراق و مقدار ۱/۳ و ۲/۳، از جریان گاز اسیدی.

• دیگ بازیافت دما

جهت خنک کردن محصولات احتراق، بیشتر واحدهای کلاوس، بخار با فشار ۵۰۰-۱۵۰ psig و دمای ۳۶۵-۴۷۰ F در این مرحله تولید می کنند دمای جریان گاز خنک شده معمولاً در محدوده ۷۰۰-۶۰۰ F خواهد بود.

• تبدیل کاتالیتیکی

واکنش H_2S و SO_2 را بهبود می بخشد و این مرحله معمولاً شامل ۲-۴ راکتور کاتالیستی است. گاهی کاتالیستها، واکنش های جانبی تولیدی در مرحله احتراق را نیز هیدرولیز می کنند.

• گرم کردن

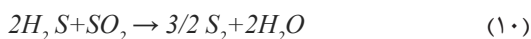
بعد از کندانس نمودن و جداسازی گوگرد، به منظور بالا نگه داشتن جریان گاز در دمایی بالاتر از نقطه شبنم گوگرد، این عمل انجام می پذیرد.

• چگالش

جریان گازی خروجی از تبدیل کننده های کاتالیستی باید خنک شده و در این مورد بخار فشار ضعیف تولید می شود. معمولاً ترکیب گاز ورودی به واحدهای کلاوس حدود ۸۰-۳۰ درصد مولی هیدروژن سولفید اشباع با آب و ۱/۵ درصد هیدروکربورها و مابقی دی اکسید کربن است. در پروسه های اصلاح شده کلاوس دمای مرحله حرارتی در حدود ۱۸۰۰ تا ۲۵۰۰ درجه فارنهایت است. با توجه به وجود انواع مختلف گوگرد در دماهای مختلف معمولاً گوگرد در آن مرحله به صورت S_2 است.



$$\Delta H @ 77 F = -135200 \text{ Btu}$$



$$\Delta H @ 77 F = +20400 \text{ Btu}$$

۳. شرح مختصر جریان گاز اسیدی در واحدهای بازیافت گوگرد

همان طور که در (شکل ۱) نشان داده شده است، گاز اسیدی پس از خروج از بالای ظرف برگشتی در واحدهای تصفیه گاز، وارد Acid Gas Knock out Drum می گردد. مایع های احتمالی درون گاز، جدا شده و گاز اسیدی از بالای K.O.D گاز اسیدی، خارج شده و پس از Split شدن، وارد کوره واکنش می شود. در کوره واکنش با هوای کنترل شده مخلوط شده و احتراق صورت می گیرد. ۵۴ درصد هیدروژن سولفور موجود در گاز اسیدی در کوره واکنش به بخار گوگرد تبدیل شده و ۴۶ درصد به صورت دی اکسید گوگرد و هیدروژن سولفید باقی می ماند. هیدروکربورهای موجود در گاز اسیدی نیز در کوره واکنش محترق شده و به $CO_2, CO, H_2O, CS_2, COS$

۴. شبیه‌سازی پایا کل واحد فرآیند بازیافت گوگرد

برای شبیه‌سازی استاتیک از نرم‌افزار Aspen plus استفاده شده است. این نرم‌افزار از مجموعه نرم‌افزارهای شرکت Aspen Tech، از جمله قوی‌ترین و پرکاربردترین نرم‌افزارهای شبیه‌ساز مورد استفاده در دنیا بوده که برخلاف نرم‌افزار Hysys از دیگر محصولات این شرکت که بیشتر جنبه‌ی آموزشی و دانشگاهی دارد، نرم‌افزار Aspen plus کاملاً صنعتی و تخصصی نوشته شده و همچنین قدمت بیشتری نسبت به نرم‌افزار Hysys دارد و به همین دلیل در بیشتر شرکت‌های نفتی، شیمیایی و دارویی دنیا از نرم‌افزار Aspen استفاده می‌شود. از جمله برتری‌های دیگر این نرم‌افزار نسبت به سایر نرم‌افزارهای شبیه‌ساز مهندسی شیمی، به‌دقت بالای محاسبات، بانک اطلاعاتی بسیار جامع آن برای مواد گوناگون، میدان‌های نفتی و معادلات ترمودینامیکی، همچنین امکان انجام شبیه‌سازی فرآیندهای الکترولیت، پلیمری، جامد و غیره می‌توان اشاره کرد.

❖ اساس طراحی

این واحد برای رسیدن به بازیافت کل گوگرد با استفاده از واکنش کلاوس با واحد بالادستی برای مورد طراحی با مزایای زیر طراحی شده است:

- قابلیت و انعطاف‌پذیری بالای عملیات برای فاکتور جریان حاصل می‌شود.
- سازگاری با عملکرد گازهای ضعیف اسیدی
- ایمنی عملیات بالا
- حداقل سرمایه و هزینه‌های عملیاتی

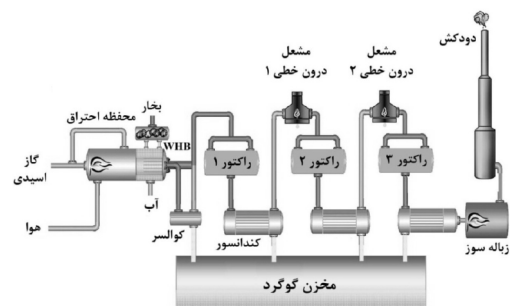
❖ شرح فرآیند

گاز اسیدی خروجی از واحد شیرین سازی وارد یک تفکیک‌کننده گاز اسیدی یا مخزن ضربه‌گیر (K.O.D) می‌شود. انتقال این مایع که حذف شده به واحد شیرین سازی گاز اسیدی به وسیله پمپ انجام می‌شود.

✓ Acid Gas K.O.D

مایع‌های همراه گاز ورودی به علت آنکه باعث خوردگی در سیستم، کاهش کارایی کاتالیست‌ها، از بین بردن شعله‌های کوره واکنش، افزایش مقدار واکنش‌های جانبی و غیره خواهند گردید. بایستی در ابتدای واحد تا حد امکان گرفته شوند. به همین منظور، مخزنی عمودی از جنس فولاد زنگ نزن

تبدیل می‌گردند. جهت جذب نمودن حرارت تولیدشده در کوره واکنش و مایع کردن بخارات گوگرد و همچنین بالا بردن راندمان فرآیند، گازهای حاصله از احتراق، پس از کوره واکنش وارد یک دیگ بخار می‌شوند تا قطرات گوگرد مایع جدا گردند. جهت کنترل حرارت، گاز ورودی به دیگ بخار به دو بخش تقسیم می‌شود. یک بخش با عبور از ۱۹۴۰ لوله دو اینچی به دمایی حدود ۲۳۰ درجه سانتی‌گراد رسیده و بخش دیگر با عبور از یک خط ۲۴ اینچ که در مرکز دیگ بخار قرار دارد به دمایی حدود ۶۳۰ درجه سانتی‌گراد می‌رسد. این دو بخش در خروجی کوالیسر اول با یکدیگر مخلوط شده و دمای گاز اسیدی ورودی به بستر کاتالیستی مرحله اول را کنترل می‌نماید. در بستر کاتالیستی مرحله اول گازهای دی‌اکسید گوگرد، هیدروژن دی‌سولفید در حضور کاتالیست‌ها یکدیگر ترکیب شده و بخار گوگرد تولید می‌نمایند. سپس گاز وارد سردکننده مرحله اول می‌شود. گوگرد مایع شده به مخزن زیرزمینی هدایت شده و گاز وارد کوالیسر دوم می‌گردد تا قطرات احتمالی گوگرد از آن جدا شوند. جهت کنترل درجه حرارت گاز، گاز اسیدی خروجی توسط کوره کمکی اول گرم شده و سپس وارد بستر کاتالیستی دوم می‌گردد. گاز اسیدی خروجی پس از آن به ترتیب وارد سردکننده مرحله دوم، کوالیسر سوم، کوره کمکی دوم، بستر کاتالیستی مرحله سوم، سردکننده مرحله سوم، کوالیسر چهارم و در نهایت زباله‌سوز می‌شود و در هر مرحله گوگرد مایع شده و به مخزن زیرزمینی هدایت می‌شود. دیگ بخار با فشار متوسط تولید می‌نمایند که جهت چرخاندن توربین دمنده‌های هوا استفاده می‌گردد. سردکننده‌های مرحله اول و دوم نیز، بخار فشار ضعیف تولید می‌کنند و سردکننده مرحله سوم هم که در فشار بسیار ضعیف ۱۴/۹ psig کار می‌کند، بخار تولیدی آن در کولر هوایی سرد گردیده و مایعات حاصله در یک ظرف جمع‌آوری شده و دوباره توسط یکی از دو پمپ به سردکننده مرحله سوم پمپ می‌شود.



شکل ۱. شماتیک کلی از واحد بازیافت گوگرد [۲۰].

به نام تفکیک کننده گاز اسیدی یا K.O.D در ابتدای واحد گرفته شده است. در این مخزن مایع های همراه گاز اسیدی از قبیل آب، هیدروکربورهای مایع و آمین با برخورد به یک صفحه فلزی یا بافل از جنس فولاد زنگ نزن و عبور از ۸ عدد مش از نوع S.S گرفته شده و از طریق یک تله بخار گاز/مایع (نوعی از ولوهای اتوماتیک) به سمت مخزن تخلیه آمین واحد تصفیه گاز هدایت می شود. برای کنترل سطح مایع های داخل تفکیک کننده دو عدد سوئیچ کنترل سطح، تعبیه شده است که بدیهی است با بالا آمدن سطح مایع های نخست سویچ و در صورت عدم تخلیه مایع ها، سپس سویچ عمل نموده و باعث S/D واحد می گردد. به همین منظور یک عدد شیر بای پاس تخلیه سریع تر مایع ها به طرف سمت آمین در نظر گرفته شده است. یک عدد گیج گلاس نیز به تفکیک کننده متصل گردیده است. در حالتی که به هر علتی نتوان مایع ها را به سمت آمین واحد تصفیه گاز تخلیه کرد. در ابتدای این مخزن شیری دستی قرار دارد که می توان به وسیله آن جریان گاز اسیدی به واحد را قطع و وصل نمود.

✓ کمپرسور:

هوای فرآیند به وسیله دو کمپرسور یا دمنده تأمین می شود. دمنده می تواند انتقال مثبت یا سانتریفیوژ، تک مرحله ای یا چند مرحله ای باشد. در واحد بازیافت گوگرد به دلیل دبی بالای هوای مورد نیاز جهت احتراق از کمپرسور استفاده می شود. جهت راه اندازی دمنده می توان از موتورهای الکتریکی یا توربین بخار استفاده کرد. توربین دمنده که برای تولید هوای مصرفی واحدهای SRU به کار می رود از فشار بخار متوسط MP استفاده می کند، بخاری که توسط W.H.B تولید می شود از نوع MP است. بخار خروجی از دمنده بخار LP است که برای جلوگیری از افزایش فشار بخار LP خروجی دو عدد PSV روی هر خروجی دمنده نصب شده است.

✓ کوره:

گاز اسیدی پس از عبور از شیر کنترل وارد مبدل می شود و پس از آن وارد یک میکسر می شود که در اینجا به دو بخش تقسیم می شود که ۱/۳ و ۲/۳ وارد کوره می شود. اندازه کوره به گونه ای انتخاب شده تا تقریباً به تعادل ترمودینامیکی در گازهای خروجی از مشعل H_2S برسد. بسیاری از واکنش های شیمیایی در کوره بخشی از سولفید هیدروژن را به بخار سولفور تبدیل می کنند.

✓ دیگ بازیافت حرارت (W.H.B):

به جهت جذب حرارت تولید شده در کوره واکنش و مایع کردن گوگرد، همچنین بالا بردن راندمان واحد، گازهای حاصله، پس از کوره واکنش وارد دیگ بخار می شوند. معمولاً در بیشتر واحدهای جدید بازیافت گوگرد با روش کلاوس، مبدل بازیافت حرارت و کوره واکنش در یک مخزن با یکدیگر ترکیب شده اند. گازهای خروجی از کوره واکنش با درجه حرارتی حدود ۸۴۰ درجه سانتی گراد از لوله های داخلی مبدل بازیافت حرارت که از نوع پوسته و لوله است عبور نموده و گرمای خود را صرف تولید بخار آب می نماید. در این مرحله ۱۵ درصد از کل گوگرد تولیدی به دست می آید. این مبدل که با بخار MP تولیدی خود به عنوان یک بویلر قابل توجه عمل نموده و نیروی محرکه دمنده های هوا را تأمین می کند.

✓ تبدیل کننده ها:

جهت تکمیل تبدیل هیدروژن سولفید به گوگرد، گازهای خروجی از دیگ بازیافت حرارت وارد تبدیل کننده های کاتالیستی می گردند. واکنش در مبدلی به نام کانورتر صورت می گیرد. در محدوده دمایی کانورترها، واکنش کلاوس یک واکنش گرمازاست و تعادل های واکنش در دماهای پایین به دست می آید. کربونیل سولفید و کربن دی سولفید در دماهای بالاتر بیشتر هیدرولیز می گردند به طوری که در دمای ۴۰۰ درجه سانتی گراد این مواد به هیدروژن سولفید به مقدار صد در صد پیشرفت خواهد نمود، بنابراین تبدیل کننده اول باید در دماهای بالاتر نگهداری شود با گذشت عمر بسترهای کاتالیستی، توانایی هیدرولیز این مواد نیز کاهش می یابد. بستر دوم و سوم کاتالیستی باید در دماهایی بالاتر از نقطه شبنم برای جلوگیری از نشست گوگرد مایع و دستیابی به نرخ واکنش مناسب فعالیت نمایند. معمولاً تبدیل کننده اول باید در دمای ورودی ۴۸۰-۴۵۰ درجه فارنهایت، تبدیل کننده دوم در دمای ورودی ۴۳۰-۳۹۰ فارنهایت و تبدیل کننده سوم در دمای ورودی ۴۱۰-۳۷۰ درجه فارنهایت نگهداری شوند. از مهم ترین کاتالیزورهای مورد استفاده در واحد کلاوس، کاتالیزور آلومینا است. علت استفاده از این کاتالیزور این است که چون واکنش هیدرولیز در دمای پایین درصد تبدیل بیشتری دارد اما زمانی که دمای پایین باشد سرعت واکنش نیز کم می شود به همین دلیل از کاتالیزور استفاده شده است.





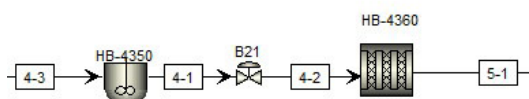
✓ چگالنده:

هر معادله تنها برای دسته خاصی از مواد و شرایط عملیاتی محدودی مناسب است و انتخاب معادله ترمودینامیکی نامناسب ممکن است منجر به نتایج شبیه‌سازی اشتباه، مخصوصاً در فرآیندهای جداسازی گردد [۲۲].

در این فرآیند برای انتخاب مدل ترمودینامیکی از روش اریک کارلسون استفاده شده است. اریک کارلسون در سال ۱۹۹۶ فلوچارتی را جهت انتخاب معادله‌ی مناسب ارائه نمود [۲۳]. در فرآیند بازیافت گوگرد به دلیل وجود مقادیر زیاد آب و هیدروژن سولفید سیستم قطبی است فشار کمتر از ۱۰ بار در طول فرآیند حفظ می‌شود چون سیال فرآیندی گازی است و سیستم مایع/مایع نیست لذا می‌توان از گروه معادلات حالت NRTL، Wilson استفاده کرد در اینجا ما از معادله NRTL استفاده شده است چون فشار پایین است سیستم به حالت ایده‌ال نزدیک است.

۴-۱. شبیه‌سازی کوره

مهم‌ترین قسمت در واحد بازیافت گوگرد به روش کلاوس اصلاح‌شده کوره واکنش است. در کوره ۱/۳ از گازهای اسیدی، همراه با تمامی ترکیب‌های مصرف‌کننده اکسیژن مانند هیدروکربورها، توسط هوا سوخته می‌شوند. با توجه به مدل ماننتی و همکاران، کوره واکنش به کمک چندین راکتور سری شبیه‌سازی می‌شوند. به دلیل انتقال سریع H_2S نسبت به ذرات دیگر، از یک راکتور با اختلاط کامل استفاده شده است. برای باقیمانده واکنش از یک راکتور جریان قالبی استفاده شده است. برای شبیه‌سازی کوره در محیط Aspen از یک راکتور mixed (اختلاط کامل) برای مشعل و یک راکتور plug برای قسمت باقیمانده استفاده شده است. در Aspen پوشه‌ی Reaction برای تعریف واکنش‌های غیر الکترولیتی استفاده می‌شود که از انواع واکنش‌های سینتیکی شدتی از Power Law برای راکتور mixed و LHHW برای plug استفاده شده است. در (جدول ۱) نتایج شبیه‌سازی کوره واکنش با داده‌های خروجی از کوره فاز ۱ پارس جنوبی مقایسه شده است. در (شکل ۲) نمایی از کوره در محیط شبیه‌سازی آمده است.



شکل ۲. تصویر کوره در محیط شبیه‌سازی

وظیفه چگالنده‌ها در واحد بازیافت گوگرد، خنک نمودن گاز فرآیند خروجی از تبدیل‌کننده‌ها جهت مایع نمودن بخارات گوگرد تولیدی در حین فرآیند کلاوس و جدا کردن این گوگرد مایع از جریان گاز است. هر چه راندمان جداسازی در هر چگالنده بالاتر باشد، راندمان تبدیل تبدیل‌کننده‌های کاتالیستی بعدی نیز بیشتر خواهد بود. جریان گاز پس از خروج از تبدیل‌کننده اول وارد چگالنده می‌گردد. چگالنده‌های گوگرد می‌توانند به صورت single pass یا Multi pass ساخته شوند. به علت دمای پایین گاز فرآیند معمولاً بخار اشباع فشار پایین LP در این تجهیزات تولید می‌شود. سرعت گاز درون لوله‌ها باید به قدری باشد تا گوگرد به صورت ذرات ریز آن در نیاید در این حالت ذرات ریز گوگرد از گاز جدا نمی‌شوند و امکان غیرفعال شدن کاتالیست‌ها وجود دارد.

✓ زباله‌سوز:

یکی از روش‌های عاری سازی گاز خروجی واحد، استفاده از زباله‌سوز است. زباله‌سوز تمام ناخالصی‌های گوگرد را به دی‌اکسید گوگرد تبدیل می‌کند.

❖ انتخاب مدل ترمودینامیکی

انتخاب مدل‌های ترمودینامیکی مناسب به‌عنوان نقطه شروع برای شبیه‌سازی درست یک فرآیند یک امر بسیار مهم است.

سه عامل کلیدی در این مورد عبارت‌اند از:

۱. مشخصه‌های سیستم (نوع و دسته مواد موجود در سیستم)
۲. شرایط عملیاتی فرآیند (دما و فشار)
۳. فازهای موجود در فرآیند (مایع و بخار)

یک فرآیند که به‌طور کامل از نظر انتخاب تجهیزات، شرایط قرارگیری و عملیاتی بهینه‌شده است، در صورت انتخاب نادرست معادله حالت می‌تواند کاملاً بی‌ارزش باشد [۲۱].

یکی از پایه‌های اصلی شبیه‌سازی انتخاب معادله ترمودینامیکی مناسب است که خصوصیات یک معادله مناسب به‌صورت زیر است:

خصوصیات فیزیکی مخلوط را به‌عنوان تابعی از دما و فشار به‌طور صحیح پیش‌بینی کند.

جدول ۱. نتایج شبیه‌سازی کوره

Stream No. 5	Industrial Data	Aspen	درصد خطا
Temperature(°C)	1039	1005.631	33.369
Pressure (barg)	0.16	0.15	0.01
Molar flow (kmol/h)	949.21	931.1976	18.0124
Composition (mole%)			
H ₂	1.45	1.04402	0.2799
O ₂	0	5.24301E-5	5.24301E-5
CO	1	0	0.01
COS	0.072	0	0.072
SO ₂	4.1036	6.81131	-0.65983
CS ₂	0.0481	0	0.0481
NH ₃	0	0	0
HCN	0	0	0
N ₂	0.4010	0.4088507	-0.019577
H ₂ O	18.63	12.51135	0.3284
H ₂ S	5.5819	12.67627	-1.2709
CO ₂	23.3127	24.96212	-0.1415
CH ₄	0	2.41041E-4	
C ₂ H ₆	0	4.54791E-5	
C ₃ H ₈	0	1.29940E-5	
C ₂ H ₆ S	0	0	
S	0	0	
S ₂	0	1.07465	
S ₃	0	0	
S ₄	0	0	
S ₅	0	0	
S ₆	0	0	
S ₇	0	0	
S ₈	0	0	

گوگردهای عنصری بود. به طوری که گوگردهای عنصری در خروجی مبدل در اثر افت دما تغییر فاز به مایع نمی‌دادند برای حل این مشکل CP، آنتالپی تشکیل و انرژی آزاد گیبس عناصر را در منبع داده‌های Aspen وارد شده است زیرا در منبع داده‌های Aspen این مشخصات تعریف نشده است. برای این کار ظرفیت حرارتی گوگردهای عنصری شامل S₂, S₆, S₈ را طبق (جدول ۲) در قسمت مشخصات مواد نرم‌افزار وارد خواهد شد.

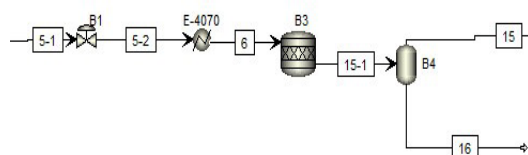
برای مشخص کردن انرژی آزاد گیبس تشکیل مولکول‌های گوگرد داده‌های کافی به دست نخواهد آمد، زیرا لازم است که حداقل مقدار n تعادلی واکنش تشکیل هر مولکول را مشخص گردد که اطلاعات کافی به دست نخواهد آمد. برای حل این مشکل تمام مولکول‌های گوگرد قبل از ورود به مبدل در یک راکتور استوکیومتری به صورت گوگردهای تک اتمی طبق (جدول ۳) وارد گردید. به این صورت درصدی از بخارهای گوگرد در مبدل تبدیل به مایع می‌شود.

خواص بحرانی گوگرد مایع که شامل S₂, S₃, S₄, S₅ و S₆ در (جدول ۴) آمده است. مولکول‌های گوگرد در دماهای مختلف به یکدیگر تبدیل می‌شوند و با یکدیگر در حال تعادل‌اند.

جدول ۴. خواص بحرانی گوگرد

Quantity	Value
Tc	1313K=1040 C
Pc	179.7atm 200atm
Vc	158 cm ³ /mol
Dc	0.563g/cm ³
vC	2.8 atoms/molecule

(شکل ۳) نمایی از شبیه‌سازی دیگ بازیافت حرارتی در محیط شبیه‌سازی را نشان می‌دهد. در (جدول ۵) نتایج خروجی دیگ بازیافت حرارتی با داده‌های صنعتی مقایسه شده است.



شکل ۳. نمایی از دیگ بازیافت حرارتی در محیط شبیه‌سازی

۴-۲. شبیه‌سازی دیگ بخار اتلاف حرارتی

جریان خروجی کوره به جهت جذب حرارت تولید شده در کوره واکنش و مایع کردن گوگرد، بالا بردن راندمان واحد مستقیماً وارد دیگ بازیافت حرارتی شده و در آنجا توسط آب اشباع شده سرد می‌شود. معمولاً در بیشتر واحدهای جدید بازیافت گوگرد کوره واکنش و دیگ بازیافت حرارت در یک مخزن با یکدیگر ترکیب شده‌اند.

برای شبیه‌سازی دیگ بازیافت حرارتی، از یک راکتور استوکیومتری، مبدل حرارتی و یک جداکننده برای جداسازی مایع استفاده شده است.

یکی از مشکلات این بخش شبیه‌سازی مایع نشدن

۳-۴. شبیه‌سازی راکتورهای کاتالیستی

جریان خروجی از دیگ بازیافت حرارتی مستقیم وارد راکتور کاتالیستی اول می‌شود. در فرآیند کلاوس ابتدا ۱/۳ هیدروژن سولفید موجود در گاز اسیدی وارد کوره می‌شود و سپس ۲/۳ باقی‌مانده هیدروژن سولفید و دی‌اکسید گوگرد در راکتورهای کاتالیستی واکنش می‌دهد و گوگرد تولید می‌نماید. واکنش‌های جانبی که در انتهای کوره انجام می‌شوند ممکن است باعث تولید COS و CS₂ شوند که به‌سختی به عنصر سولفور تبدیل می‌شود. این دو ترکیب در تبدیل‌کننده‌های کاتالیستی هیدرولیز می‌شوند و به سولفید هیدروژن تبدیل می‌شوند.

جدول ۲. ظرفیت حرارتی گوگردهای عنصری در دماهای مختلف

T(°F)	Heat Capacity (Btu/R.Ib.mole)			T(k)	Heat Capacity (J/K.mole)		
	S ₂	S ₆	S ₈		S ₂	S ₆	S ₈
100	7.825	20.185	26.245	310.928	32.762	84.511	109.884
200	8.035	20.47	26.635	366.483	33.641	85.705	111.516
300	8.1908	20.7692	27.0242	422.039	34.294	86.957	113.146
400	8.3233	21.0708	27.4233	477.594	34.848	88.220	114.817
500	8.4392	21.3658	27.7883	533.150	35.334	89.455	116.345
600	8.53	21.6533	28.2092	588.706	35.714	90.659	118.107
700	8.585	21.9558	28.6375	644.261	35.944	91.925	119.901
800	8.6458	22.25	29.0025	699.817	36.199	93.157	121.429
900	8.7033	22.5442	29.3942	755.372	36.439	94.389	123.069
1000	8.7367	22.8458	29.79	810.928	36.579	95.652	124.726
1100	8.7608	23.14	30.185	866.483	36.680	96.883	126.38
1200	8.7808	23.435	30.5792	922.039	36.764	98.119	128.03
1300	8.7883	23.73	30.9817	977.594	36.795	99.354	129.715
1400	8.805	24.03	31.38	1033.750	36.865	100.61	131.383
1500	8.95	24.315	31.75	1088.71	37.4722	101.803	132.932

جدول ۳. داده‌های ترمودینامیکی گوگرد گازی

Molecule	Equilibrium	ΔH f ₀ (kcal/mol)	S ₀ (cal/mol.deg)
S ₂	2S(S) ↔ S ₂ (g)	31.2	54.4
S ₃	2S ₃ (g) ↔ 3S ₂ (g)	33.81	64.39
S ₄	S ₄ (g) ↔ 2S ₂ (g)	34.84	74.22
S ₅	2S ₅ (g) ↔ 5S ₂ (g)	26.14	73.74
S ₆	3/4S ₈ (g) ↔ S ₆ (g)	24.36	84.6
S ₇	7/8S ₈ (g) ↔ S ₇ (g)	27.17	97.41
S ₈	S ₈ (g) ↔ 4S ₂ (g)	24.32	102.76

در دماهای پایین‌تر درصد تبدیل بیشتری دارد ولی زمانی که در گاز فرآیند CS₂ و COS موجود باشد دمای تبدیل‌کننده علی‌رغم اینکه واکنش تعادل $H_2S + SO_2 \leftrightarrow 1/2S_6 + 2H_2O$ اول باید بالاتر باشد تا باعث پیشرفت دو واکنش هیدرولیز



جدول ۵. نتایج شبیه‌سازی دیگ بازیافت حرارتی

Stream No.6	Industrial Data	Aspen	درصد خطا
Temperature(°C)	315	315	
Pressure (barg)	0.13	0.08	0.05
Molar flow (kmol/h)	910.39	929.3462	18.9562
Composition (mole%)			
H ₂	1.45	1.04610	0.27855
O ₂	0	5.2534E-5	5.2534E-5
CO	0.86	0	0.86
COS	0.2588	0	0.2588
SO ₂	4.286	6.82488	-0.5923
CS ₂	0.0501	0	0.0501
NH ₃	0	0	0
HCN	0	0	0
N ₂	41.81	40.96652	0.02
H ₂ O	19.43	12.5367	0.35477
H ₂ S	5.8817	12.70153	-1.59
CO ₂	24.3069	25.01185	-0.029
CH ₄	0	2.41521E-4	
C ₂ H ₆	0	4.55697E-5	
C ₃ H ₈	0	1.30199E-5	
C ₂ H ₆ S	0	0	
S	0	2.15359E-3	
S ₂	0	4.30718E-3	
S ₃	0	7.17863E-4	
S ₄	0	5.38398E-4	
S ₅	0	4.30718E-4	
S ₆	0	3.58932E-4	
S ₇	0	0	
S ₈	0	2.69199E-4	

۴-۴. شبیه‌سازی کل واحد

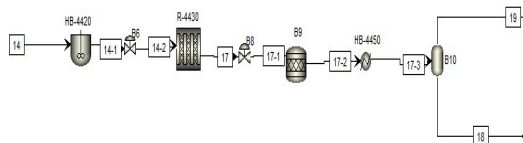
نقشه جریان فرآیندی حاصل از شبیه‌سازی پایا پالایشگاه یکم مجتمع گاز پارس جنوبی به صورت (شکل ۷) می‌باشد. قسمت اعظم تبدیل هیدروژن سولفید به گوگرد در کوره واکنش فرآیند بازیافت گوگرد انجام می‌شود که در این شبیه‌سازی برای کوره از یک راکتور مخلوط کننده^۱ (CSTR) و یک راکتور لوله‌ای^۲ در دو حالت دمای ثابت و آدیاباتیک استفاده شده است.

1. Continuous-Stirred Tank Reactor
2. Plug

CS₂ و COS شود این واکنش‌های هیدرولیز در بازدهی کل فرآیند کلاوس تأثیر می‌گذارد زیرا این دو ترکیب در اثر هیدرولیز به هیدروژن سولفید تبدیل شده که به‌عنوان واکنشگر در واکنش اصلی مصرف می‌شود به همین دلیل دما و غلظت در راکتورهای دوم و سوم به اندازه‌ای پایین است که واکنش هیدرولیز انجام نمی‌شود.

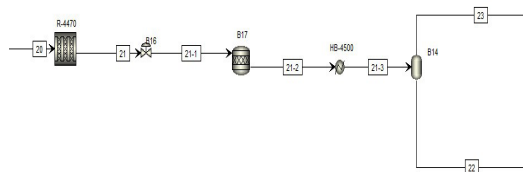
برای شبیه‌سازی راکتور کاتالیستی اول از یک راکتور plug استفاده شده است سپس به دلیل اینکه واکنش‌های هیدرولیز در راکتور اول اتفاق می‌افتد و این واکنش‌ها سینتیکی هستند در Aspen از پوشه Reaction مدل LHHW انتخاب شده است. سپس مانند دیگ بازیافت حرارتی از یک راکتور استوکیومتری با واکنش‌های (جدول ۳) استفاده شده است. همچنین از یک راکتور CSTR همانند مشعل برای شبیه‌سازی راکتور کاتالیستی اول به دلیل وجود اکسیژن زیاد استفاده شده است. برای جداسازی مایع نیز از یک جداکننده استفاده شده است.

(شکل ۴) نمایی از شبیه‌سازی راکتور کاتالیستی اول در محیط شبیه‌سازی را نشان می‌دهد. نتایج خروجی از راکتور کاتالیستی اول در (جدول ۶) با داده‌های صنعتی مقایسه شده است.



شکل ۴. نمایی از راکتور کاتالیستی اول در محیط شبیه‌سازی

راکتورهای کاتالیستی دوم و سوم با استفاده از یک راکتور plug، استوکیومتری و جداکننده مایع شبیه‌سازی می‌شوند با این تفاوت که واکنش‌های هیدرولیز در نظر گرفته نمی‌شود. در (جدول‌های ۷ و ۸) نتایج خروجی از راکتورهای کاتالیستی دوم و سوم با داده‌های صنعتی مقایسه شده است. همچنین (شکل‌های ۵ و ۶) نمایی از شبیه‌سازی راکتورهای کاتالیستی دوم و سوم را در محیط شبیه‌سازی نشان می‌دهد.

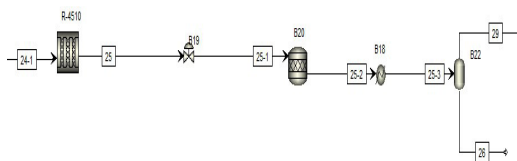


شکل ۵. نمایی از راکتور کاتالیستی دوم در محیط شبیه‌سازی

جدول ۷. نتایج شبیه سازی راکتور کاتالیستی دوم

Stream No.21	Industrial Data	Aspen	درصد خطا
Temperature(°C)	214.9	196.7889	18.1111
Pressure (barg)	-0.01	-0.01	0
Molar flow (kmol/h)	931.11	989.8061	58.9661
Composition (mole%)			
H ₂	1.47	0.00982204	0.99
O ₂	0	1.02805	1.02805
CO	0.96	0	0.96
COS	0.0018	0	0.0018
SO ₂	1.2218	6.41315	-4.24
CS ₂	0	0	0
NH ₃	0	0	0
HCN	0	0	0
N ₂	45.44	42.75012	0.059
H ₂ O	25.89	11.95076	0.53
H ₂ S	0.1472	11.92053	-0.79
CO ₂	24.6044	23.54673	0.042
CH ₄	0	5.59606E-3	
C ₂ H ₆	0	8.81743E-5	
C ₃ H ₈	0	1.34955E-5	
C ₂ H ₆ S	0	0	
S	0	1.01102E-3	
S ₂	0	6.06613E-3	
S ₃	0	3.37007E-4	
S ₄	0	2.52755E-4	
S ₅	0	2.02204E-4	
S ₆	0	3.37007E-5	
S ₇	0	2.88863E-5	
S ₈	0	4.54960E-4	

برای شبیه سازی قسمت باقیمانده کوره که دیگ بازیافت حرارتی است از یک راکتور استوکیومتری با واکنش های (جدول ۱) برای مایع کردن گوگرد استفاده شده است سپس از یک مبدل سردکننده برای سرد کردن استفاده شده است. سپس برای ۲/۳ باقی مانده گاز اسیدی با گوگرد به شبیه سازی راکتورهای کاتالیستی پرداخته



شکل ۶. نمایی از راکتور کاتالیستی سوم در محیط شبیه سازی

جدول ۶. نتایج شبیه سازی راکتور کاتالیستی اول

Stream No.17	Industrial Data	Aspen	درصد خطا
Temperature(°C)	316.9	249.9999	65.9001
Pressure (barg)	0.06	0.05	0.01
Molar flow (kmol/h)	925.76	971.7207	45.9607
Composition (mole%)			
H ₂	1.46	1.00048	0.3147
O ₂	0	6.9708E-3	6.9708E-3
CO	0.93	0	0.93
COS	0.0022	0	0.0022
SO ₂	1.7686	6.53251	-2.69
CS ₂	0	0	0
NH ₃	0	0	0
HCN	0	0	0
N ₂	44.34	42.24771	0.04718
H ₂ O	24.57	12.1585	0.5
H ₂ S	1.2363	12.14239	-8.8
CO ₂	24.5853	23.98494	0.0244
CH ₄	0	3.88561E-3	
C ₂ H ₆	0	7.60767E-5	
C ₃ H ₈	0	1.33620E-5	
C ₂ H ₆ S	0	0	
S	0	2.05968E-3	
S ₂	0	4.11935E-3	
S ₃	0	6.86559E-4	
S ₄	0	5.14919E-4	
S ₅	0	4.11935E-4	
S ₆	0	3.43280E-4	
S ₇	0	0	
S ₈	0	2.57460E-4	



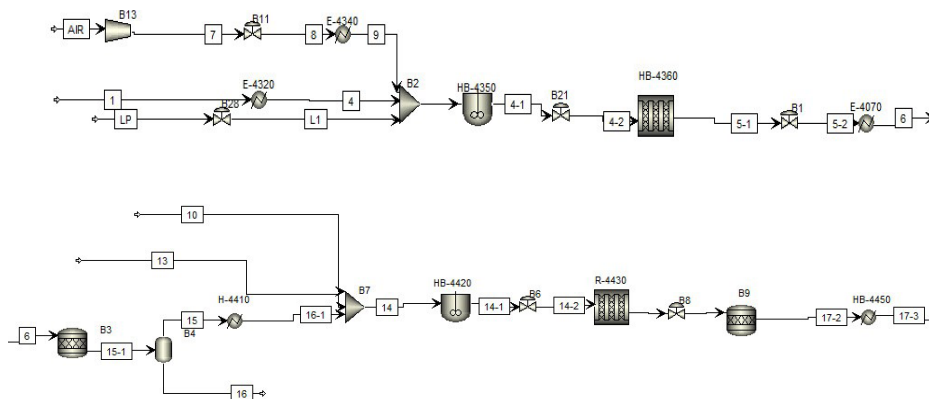
جدول ۸. نتایج شبیه سازی راکتور کاتالیستی سوم

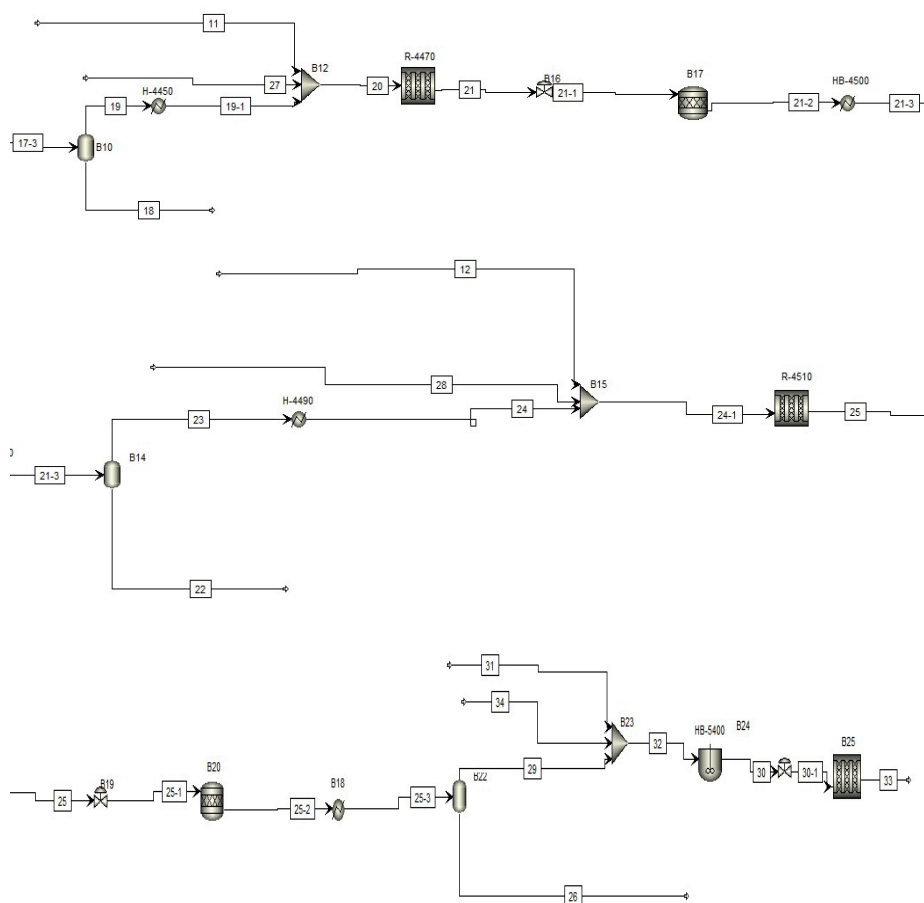
Stream No.25	Industrial Data	Aspen	درصد خطا
Temperature(°C)	189.3	186.5676	2.7324
Pressure (barg)	-0.08	-0.08	0
Molar flow (kmol/h)	941.72	1001.815	60.035
Composition (mole%)			
H ₂	1.45	0.00970430	0.99
O ₂	0	1.25676	1.25676
CO	0.97	0	0.97
COS	0.0015	0	0.0015
SO ₂	1.1646	6.303628	-4.4
CS ₂	0	0	0
NH ₃	0	0	0
HCN	0	0	0
N ₂	45.88	43.13135	0.059
H ₂ O	25.97	11.81793	0.54
H ₂ S	0.0588	11.77764	
CO ₂	24.4357	23.26450	0.047
CH ₄	0	6.77488E-3	
C ₂ H ₆	0	9.65503E-5	
C ₃ H ₈	0	1.35978E-5	
C ₂ H ₆ S	0	0	
S	0	1.29857E-3	
S ₂	0	4.44512E-3	
S ₃	0	4.32858E-4	
S ₄	0	3.24643E-4	
S ₅	0	2.59715E-4	
S ₆	0	2.46396E-4	
S ₇	0	5.4362E-5	
S ₈	0	5.84446E-4	

شده است. برای شبیه سازی راکتور کاتالیستی اول از یک راکتور مخلوط کننده همانند بخش کوره و یک راکتور لوله ای استفاده شد و همچنین برای شبیه سازی راکتورهای کاتالیستی دوم و سوم از یک راکتور لوله ای به کار برده شد. در شبیه سازی راکتورهای کاتالیستی نیز برای مایع کردن گوگرد از راکتور استوکیومتری با واکنش های (جدول ۱) استفاده شده است. گاز خروجی از راکتور سوم وارد زباله سوز می شود که همانند کوره واکنش از یک راکتور مخلوط کننده که در آن اکسیژن زیاد است و یک راکتور لوله ای که بدنه زباله سوز می باشد شبیه سازی شده است. سپس خروجی زباله سوز وارد دودکش می شود.

برای بررسی دقیق و اطمینان از درست بودن شبیه سازی، مقایسه ای بین داده های طراحی و نتایج حاصل از شبیه سازی صورت می گیرد. نتایج حاصل از شبیه سازی پایا برای جریان های ۵ (جریان بعد از کوره)، جریان ۶ (دیگ بازیافت حرارتی)، جریان ۱۷ (جریان بعد راکتور کاتالیستی اول)، جریان ۲۱ (جریان بعد راکتور کاتالیستی دوم) و جریان ۲۵ (جریان بعد راکتور کاتالیستی سوم) با مقدار طراحی مقایسه شده است.

میانگین خطا برای کل محصولات برای جریان های جریان های ۵ (جریان بعد از کوره)، جریان ۶ (دیگ بازیافت حرارتی)، جریان ۱۷ (جریان بعد راکتور کاتالیستی اول)، جریان ۲۱ (جریان بعد راکتور کاتالیستی دوم) و جریان ۲۵ (جریان بعد راکتور کاتالیستی سوم) به ترتیب برابر ۱/۳۴ درصد، ۰/۳۸ درصد، ۱/۳۵ درصد، ۱/۴۲ درصد و ۰/۵۳ درصد به دست آمده است که خطای نسبتاً کمی می باشد، اما در بعضی موارد خطای نسبی بالاست که به دلیل ناچیز بودن مقادیر دبی آن ها کوچک ترین تغییر در آنها باعث افزایش میزان خطا می شود.





شکل ۷. نقشه جریان فرآیندی حاصل از شبیه سازی پایا

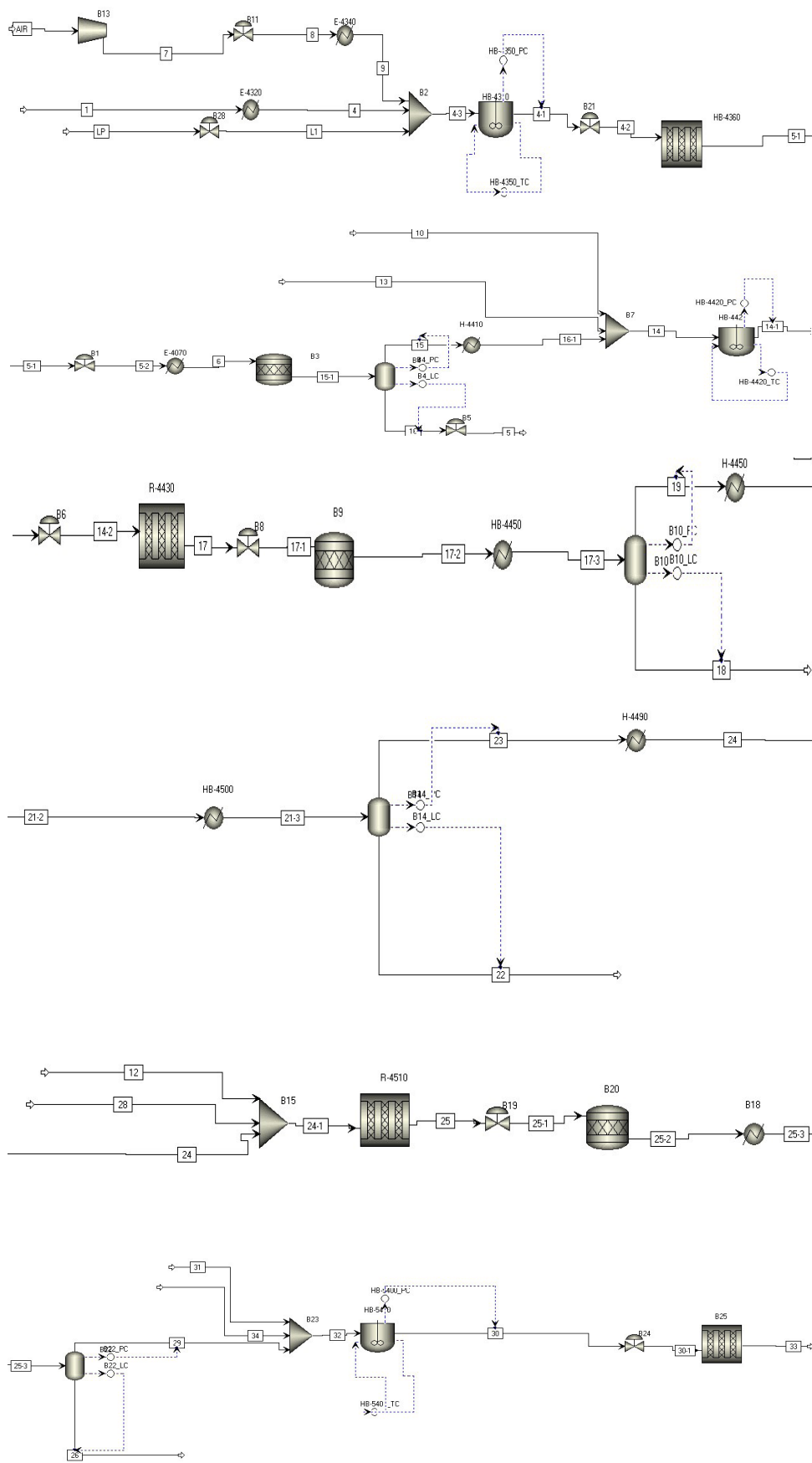
۵. شبیه سازی دینامیکی

شبیه سازی، طراحی و کنترل بهتر فرآیندهای شیمیایی با شبیه سازی دینامیکی امکان پذیر است. واحدهای شیمیایی در واقعیت هیچ گاه در حالت پایا نمی باشند زیرا اغتشاشات تجهیزات و خوراک در هر لحظه شرایط پایدار فرآیندی را تحت تأثیر قرار می دهد. بررسی ناپایدار سیستم با استفاده از شبیه سازی دینامیک ممکن خواهد شد. با استفاده از شبیه سازی دینامیک می توان اطمینان حاصل کرد که محصول دلخواه با عملکرد مناسب تولید می شود. همچنین با تعیین مشخصات دقیق تجهیزات در حالت دینامیک می توان رفتار تجهیزات در شرایط واقعی واحد را بررسی کرد [۲۴]. در این تحقیق از نرم افزار Aspen Dynamic برای شبیه سازی حالت دینامیک استفاده شد.

انجام شبیه سازی دینامیکی به دو روش، بر اساس جریان^۱ و بر اساس فشار^۲ امکان پذیر است. در روش شبیه سازی

دینامیکی بر اساس جریان، پارامترهای فشار و سرعت هر جریان خروجی از دستگاه بر اساس شرایط جریان ورودی و مشخصات خود دستگاه تعیین می شود و تجهیزات پایین دستی هیچ گونه تأثیری روی آن ندارد. در برخی مواقع دبی جریان های خروجی به وسیله کنترل کننده های فشار سطح که به صورت پیش فرض در شبیه سازی دینامیکی ایجاد می شوند، تعیین می گردند. در روش شبیه سازی دینامیکی بر اساس فشار، برای تعیین دبی و فشار جریان های خروجی باید فشار و جریان دستگاه های پایین دستی فرایند در نظر گرفته شود. در این روش فرض می شود که فشار خوراک و محصولات ثابت است اما سرعت خوراک متغیر است. همچنین سرعت تمامی جریان ها به وسیله فشار، نسبت فشار و سرعت اطراف آن تعیین می شود. در شبیه سازی دینامیکی بر اساس فشار به تعداد زیادی پمپ، کمپرسور و شیر کنترل نیاز است، از این رو حجم محاسبات به دلیل افزایش پارامترها بالا می رود [۲۵].

1. Flow Driven
2. Pressure Driven

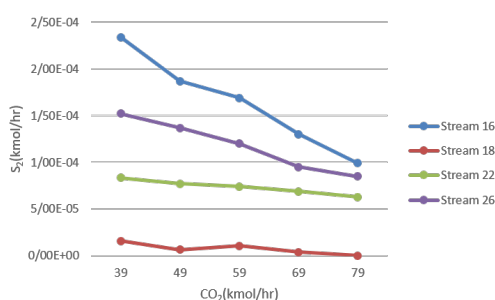


شکل ۸. نقشه جریان فرآیندی حاصل از شبیه سازی دینامیکی

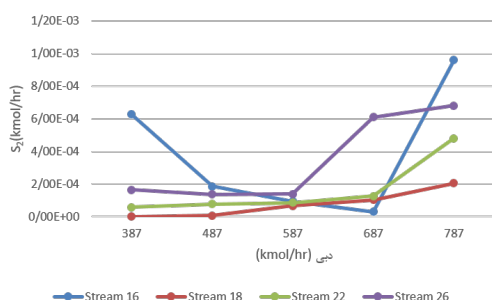


۶. بررسی تغییرات غلظت CO₂ و تأثیر آن بر میزان کیفیت گوگرد تولیدی

در این بخش تأثیر افزایش پله‌ای غلظت مقدار CO₂ از ۳۹ به ۷۹ (kmol/hr) بر میزان محصول S₂ در جریان‌های خروجی از دیگ بازیافت حرارتی و چگالنده‌های پس از هر راکتور کاتالیستی مورد بررسی قرار می‌گیرد.



شکل ۸. تأثیر افزایش CO₂ بر جریان‌های مایع خروجی از چگالنده دیگ اتلاف حرارتی و راکتورهای کاتالیستی



شکل ۹. تأثیر افزایش دبی بر جریان مایع خروجی چگالنده‌های دیگ اتلاف حرارتی و راکتورهای کاتالیستی

با توجه (شکل ۹)، نتایج نشان می‌دهد که با افزایش CO₂ میزان گوگرد تولیدی در خروجی دیگ اتلاف حرارتی و راکتورهای کاتالیستی که با شماره جریان‌های ۱۶، ۱۸، ۲۲ و ۲۶ نشان می‌دهند، کاهش یافته است.

۱۶: جریان مایع خروجی از چگالنده دیگ اتلاف حرارتی
 ۱۸: جریان مایع خروجی از چگالنده پس از راکتور کاتالیستی اول
 ۲۲: جریان مایع خروجی از چگالنده پس از راکتور کاتالیستی دوم
 ۲۶: جریان مایع خروجی از چگالنده پس از راکتور کاتالیستی سوم
 با توجه به نتایج بدست آمده می‌توان نتیجه گرفت که با افزایش CO₂ مجموع جریان‌های مایع خروجی از دیگ اتلاف حرارتی و راکتورهای کاتالیستی کاهش یافته در نتیجه میزان

در شبیه سازی مورد مطالعه به دلیل نبود پمپ و کمپرسور و همچنین تفاوت ناچیز بین نتایج حاصل از این دو روش، شبیه سازی دینامیکی بر اساس جریان استفاده شده است. همچنین دلیل استفاده از این حالت این است که تمرکز بر روی دبی جریان‌ها هست لذا بهتر است از این حالت استفاده شود.

پس از انتقال شبیه سازی به Aspen Dynamic نرم‌افزار در نمودار جریانی^۱ اولیه همان طور که در (شکل ۸) مشاهده می‌فرمایید، به صورت پیش فرض کنترل کننده‌هایی را برای برخی تجهیزات و جریان‌ها قرار داده است. کنترل کننده‌های مورد استفاده در اینجا همگی از نوع کنترل کننده PID قرار می‌گیرد. از جمله این کنترل کننده‌ها، کنترل کننده فشاری و دمای راکتور مخلوط کننده می‌باشد. سپس به منظور اطمینان از اجرا شدن تمام موارد برنامه گزینه‌ی initialization انتخاب شده است که پیغام اجرا شدن کامل برنامه را می‌دهد. مرحله بعد حصول اطمینان از کارکرد صحیح انتگرال گیر است. برای این کار باید از حالت initialization به حالت Dynamic برگشته و مجدد دکمه‌ی اجرا را کلیک کرد.

جهت کنترل دمای جریان خروجی به لیترها یا مبدل‌ها از یک کنترل کننده دمایی استفاده می‌شود و جهت کنترل فشار درون جدا کننده دو فازی از یک کنترل کننده فشاری مورد استفاده قرار می‌گیرد. این کار با کنترل جریان مایع خروجی انجام می‌شود.

کنترل کننده‌های دمایی به این صورت عمل می‌کنند که با افزایش دمای جریان مبدل با کاهش بار حرارتی خود سبب پایین آوردن دمای جریان می‌شود لذا باید عملکرد کنترل کننده در حالت Reverse قرار گیرد.

اختلاف بسیار کم بین داده‌های طراحی و نتایج حاصل از شبیه‌سازی دینامیک نمایانگر انتخاب درست و مناسب کنترل کننده‌ها با پارامترهای کنترلی مناسب می‌باشد. میانگین خطا دینامیک برای کل محصولات برای جریان ۵ (جریان بعد از کوره)، جریان ۶ (دیگ بازیافت حرارتی)، جریان ۱۷ (جریان بعد راکتور کاتالیستی اول)، جریان ۲۱ (جریان بعد راکتور کاتالیستی دوم) و جریان ۲۵ (جریان بعد راکتور کاتالیستی سوم) به ترتیب برابر ۰/۳۳ درصد، ۰/۹۹ درصد، ۸/۹۸ درصد، ۱/۴۳ درصد و ۰/۵۳ درصد به دست آمده است که خطای نسبتاً کمی می‌باشد.

1. Flowsheet

S₂ تولیدی نیز کاهش می‌یابد.

CO₂ میزان گوگرد تولیدی و جریان‌های خروجی کاهش می‌یابد. به طور کلی این نتایج را به صورت زیر می‌باشد:

- با افزایش میزان ۵۰ درصدی CO₂ مقدار گوگرد تولیدی به‌طور میانگین ۴ درصد کاهش می‌یابد.
- با افزایش میزان ۵۰ درصدی دبی هوای ورودی میزان گوگرد تولیدی تا ۲ برابر افزایش می‌یابد.
- با نصب کنترل‌کننده‌های دما و فشار بر روی راکتورها می‌توان به تولید مطلوب گوگرد دست یافت.
- افزایش ۵۰ درصدی دبی هوای ورودی، باعث می‌شود دمای احتراق ۳۶ درجه سانتی‌گراد افزایش یابد.

مراجع:

- [۱]. رضا زاده فیض آبادی ر، روش‌های مختلف بازیافت گوگرد از گازهای اسیدی و تشریح فرآیند تولید گوگرد در پالایشگاه گاز خانگیران، سمینار کارشناسی ارشد دانشگاه آزاد اسلامی واحد شاهرود، زمستان ۱۳۸۶.
- [۲]. جوادى نسب ب، بازیافت گوگرد فرآیند کلاوس اصلاح شده سینتیک شبیه‌سازی بهینه‌سازی الگوریتم ژنتیک، صنعتی شریف، ۱۳۸۵.
- [۳]. زارعی نژاد ب، تحقیق درباره پارامترهای تاثیر گذار در مورد انتخاب کاتالیزورهای مناسب برای مبدل های کلاوس واحد SRU، ۱۳۸۶.
- [۴]. پهلوان م، فنايي م.ع، مدل‌سازی و شبیه‌سازی کوره واکنش کلاوس، ۱۳۹۳.
- [۵]. زارعی س، گنجی ح، سعدی م، رشیدزاده م، مدل‌سازی و بهینه‌سازی کوره واکنش کلاوس، ۱۳۹۴.
- [۶]. قهر آلود ه، فارسی م، رحیم پور م.ر، مدل‌سازی و بهینه‌سازی فرآیند صنعتی کلاوس: بخش حرارتی و کاتالیزوری، ۱۳۹۰.
- [۷]. ایرانمش ه، مجیدیان ن، بررسی دمای کوره واکنش و تاثیر آن بر میزان بازیافت گوگرد در واحدهای بازیافت گوگرد، دومین کنفرانس بین المللی دستاورد های نوین پژوهشی در شیمی و مهندسی شیمی.
- [۸]. عبدلی پ، حزباوی ع، بررسی اثر غلظت هیدروژن سولفید بر میزان بازیافت گوگرد و دمای احتراق کوره

۷. بررسی تغییر دمای کوره بر اثر تغییر دبی هوا و تأثیر آن بر میزان کیفیت گوگرد تولیدی

در این بخش تأثیر افزایش پلهای دبی هوا از ۳۸۷ تا ۷۸۷ (kmol/hr) بر میزان محصول S₂ در جریان‌های مایع خروجی از دیگ بازیافت حرارتی و چگالنده‌های پس از هر راکتور کاتالیستی (جریان‌های ۱۶، ۱۸، ۲۲ و ۲۶) مورد بررسی قرار گرفته شده است.

با افزایش دبی هوا از ۳۸۷ تا ۷۸۷، دمای کوره واکنش از ۹۷۲ تا ۱۰۰۸ درجه سانتی‌گراد افزایش پیدا می‌کند. در (شکل ۱۰) تأثیر افزایش دبی هوا بر میزان گوگرد تولیدی نشان داده شده است. همان‌طور که در (شکل ۴) نشان داده شده با افزایش دبی هوای ورودی از ۳۸۷ تا ۴۸۷ (kmol/hr) میزان گوگرد تولیدی S₂ کمی کاهش می‌یابد و سپس با افزایش دبی هوای ورودی ۴۸۷ تا ۷۸۷ (kmol/hr) میزان گوگرد تولیدی جریان‌های مایع خروجی از دیگ اتلاف حرارتی و راکتورهای کاتالیستی افزایش یافته است، زیرا افزایش دبی هوای ورودی باعث افزایش دمای کوره و در نتیجه میزان S₂ که وابسته به دما است می‌شود.

۸. نتیجه گیری

در این مقاله، با توجه به اینکه گاز استحصال از منابع نفت و گاز دارای مقدار زیادی گاز سولفید هیدروژن می‌باشد این ترکیب بسیار خورنده است و باید از جریان گازها حذف شود. همچنین بیان شد که یکی از فرآیندهای انجام شده بر روی گاز ترش، تبدیل هیدروژن سولفید به عنصر گوگرد است که اغلب با استفاده از فرآیند کلاوس اصلاح شده انجام می‌شود که شرح فرآیند، اجزای آن و واکنش‌های آن مورد بررسی قرار گرفت.

فرآیند شبیه‌سازی آن توسط نرم‌افزار Aspen plus با استفاده از داده‌های شرکت نفت پارس جنوبی انجام گردید. در این شبیه‌سازی سعی شد تمام اجزای فرآیند شبیه‌سازی شود. همچنین تمام واکنش‌های اصلی کوره و راکتورهای کاتالیستی با داده‌های سینتیکی موجود و بیشتر واکنش‌های جانبی آنها کوره با سینتیک‌های مربوطه در نظر گرفته شده است.

همچنین تأثیر تغییرات دمای کوره که از تغییر دبی هوا منجر می‌شود و غلظت CO₂ بر میزان گوگرد تولیدی را بررسی گردید. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش دمای کوره گوگرد تولیدی و جریان‌های مایع خروجی افزایش می‌یابد و با افزایش



1997, 36, 4087-4093.

[19]. Karan, K. Mehrotra, A. K. and Behie, L. A., "COS-Forming Reaction between CO and Sulfur: A High-Temperature Intrinsic Kinetics Study", *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 37, No. 12, 1998, pp. 4609-4616.

[20]. کورش اسفندیاری، محمدرضا مرادی، اکبر شاهسون، ارائه روشی جهت بهبود شبیه‌سازی واحدهای بازیافت گوگرد توسط نرم افزار پرومکس در حضور ترکیبات سنگین آروماتیک، فصلنامه تخصصی علمی ترویجی فرآیند نو/ بهار ۱۳۹۲ / شماره ۴۱.

[21]. حامد مولوی، حسن پورحسن، طراحی و شبیه‌سازی فرآیندهای شیمیایی با نرم افزار Aspen، انتشارای طرح ویرایش دوم، ۱۳۸۲.

[22]. اسماعیل کوهستانیان، جعفر صادقی، داود محبی کلهری، شبیه‌سازی و طراحی فرآیندهای نفت، گاز و شیمیایی با Aspen Plus. سازمان انتشارات جهاد دانشگاهی، چاپ اول، ۱۳۹۶.

[23]. Carlson. E. C., "Don't Gamble with Physical Properties for Simulations", *Chemical Engineering Process*, October 1996, pp. 35-45.

[24]. Karan, K, and Behie, L. A, "CS₂ Formation in the Claus Reaction Furnace: A Kinetic Study of Methane-Sulfur and Methane-Hydrogen Sulfide Reactions", *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 43, No. 13, 2004, pp. 3304-3313.

[25]. Meyer, B., "Preparation and properties of Sulfur Allotropes", *Elemental Sulfur*, Chapter 4, John Wiley & Sons, London, 1965, pp. 71-93.

واحد بازیافت گوگرد، اولین مسابقه کنفرانس بین‌المللی جامع در علوم مهندسی در ایران، ۱۳۹۴.

[۹]. سعید م، زیاری ا، خراشه ف، مدل‌سازی سینتیکی تبدیل‌کننده‌های کاتالیستی واحد کلاوس، دوازدهمین کنگره مهندسی شیمی ایران دانشگاه صنعتی سهند، ۱۳۸۹.

[۱۰]. کاظم پور ه، پورفارسی ف، مهرپویا م، مدل‌سازی و بهینه‌سازی چند بخش حرارتی فرآیند کلاوس براساس مدل سینتیکی، ۱۳۹۵.

[۱۱]. ادیمی م، غریبی ا، کنترل فازی فرآیند کلاوس در واحد بازیابی گوگرد، ۱۳۹۵.

[۱۲]. پهلوان م، شبیه‌سازی دینامیکی و بررسی سیستم کنترل واحد بازیافت گوگرد پالایشگاه گازی، ۱۳۹۳.

[۱۳]. جعفری نژاد ش، کنترل ترکیبات گوگرد به ویژه انتشار اکسید گوگرد SO_x از صنعت نفت: یک مرور، ۱۳۹۴.

[۱۴]. حجازی م، شبیه‌سازی و بهینه‌سازی واحد بازیافت گوگرد پالایشگاه آبادان، ۱۳۹۵.

[۱۵]. احمدی ا، شبیه‌سازی و بهینه‌سازی مصرف انرژی واحد بازیابی گوگرد، پایان‌نامه کارشناسی ارشد دانشگاه باهنر کرمان، ۱۳۸۸.

[۱۶]. لالی ع، شبیه‌سازی دینامیکی و بررسی تغییرات غلظت CO₂ و H₂S بر میزان کیفیت گوگرد تولیدی واحد SRU پالایشگاه پنجم مجتمع گاز پارس جنوبی، پایان‌نامه کارشناسی ارشد دانشگاه سیستان و بلوچستان، ۱۳۹۳.

[17]. Mohammad Hosein Eghbal Ahmadi, Amirhosein Rad, Plant-Wide Simulation Model for Modified Claus Process Based on Simultaneous Data Reconciliation and Parameter Estimation, *CHEMICAL ENGINEERING TRANSACTIONS*, VOL. 57, 2017.

[18]. Shimin Tong, Ivo G. Dalla Lana, and Karl T. Chuang, Effect of Catalyst Shape on the Hydrolysis of COS and CS₂ in a Simulated Claus Converter, *Ind. Eng. Chem. Res.*



Dynamic Simulation and Investigation of Changes in Operating Parameters on the Amount of Sulfur Produced in the SRU Unit - a Case Study of the No 1 Refinery of South Pars Gas Complex

Alireza Shahsavari¹, Alireza Binaee², Mohammad Reza Sardashti Birjandi^{3*}, Farhad Shahraki⁴, Jafar Sadeghi⁵

1. M.Sc. student, Department of Chemical Engineering, Shahid Nikbakht Faculty of Engineering, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan, Iran
2. M.Sc., Department of Chemical Engineering, Shahid Nikbakht Faculty of Engineering, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan, Iran
3. Assistant Professor, Department of Chemical Engineering, Shahid Nikbakht Faculty of Engineering, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan, Iran
4. Professor, Department of Chemical Engineering, Shahid Nikbakht Faculty of Engineering, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan, Iran
5. Associate Professor, Department of Chemical Engineering, Shahid Nikbakht Faculty of Engineering, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan, Iran

*Corresponding Author, E-Mail Address: m.r_sardashti@eng.usb.ac.ir

Abstract

Sulfur is one of the most important products in the processing of oil and gas, which is used in important industries such as sulfuric acid production and agriculture. Hence, the improvement of the efficiency of sulfur production processes at the industrial scale has paid a lot of attention. Due to some process problems such as the presence of heavy aromatic compounds and inappropriate temperature, the efficiency of this unit decreases. Therefore, in this paper, the steady state simulation of the modified Claus process of the Sulphur Recovery unit of the first refinery of the South Pars Gas Complex using Aspen Plus software has been done. The dynamics of CO₂ concentration and furnace temperature were also studied. The simulation accuracy is desirable in the stable and dynamic state, so that the average error for the simulation flow data compared to the industrial data is 2.52% and 2.11% for the dynamic and dynamic mode, respectively. In addition, the results indicate an increase for sulfur produced by increasing the furnace temperature and reducing the concentration of CO₂.

Keywords: Sulfur Recovery, Modified Claus Process, Steady state and Dynamic Simulation, Aspen, Change operational parameters

