

شبهه‌سازی و بررسی فرایند تولید اولفین بر پایه اتان

رضا سید مهدیزاده، محمدرضا سحرخوان، محمدرضا دهقانی*

تهران، دانشگاه علم و صنعت ایران، دانشکده مهندسی شیمی

پیام نگار: m_dehghani@iust.ac.ir

چکیده

ترکیبات اولفینی از مهم‌ترین هیدروکربن‌های سیرنشده هستند. این ترکیبات در صنایع گوناگون نقش کلیدی ایفا می‌کنند. از جمله مهم‌ترین روش‌های تولید اولفین، کراکینگ هیدروکربن‌های سیرشده با بخار آب است. بهینه‌سازی اقتصادی و عملیاتی در واحدهای تولید اولفین، بدلیل پیچیدگی تحلیل کیفی و اقتصادی این فرایندها از اهمیت بالایی برخوردار است. استفاده از نرم افزارهای شبهه‌ساز امکان انجام این مطالعات را فراهم کرده‌اند. در این مقاله فرایند تولید اولفین بر پایه دانش فنی شرکت لینده توسط نرم افزار HYSYS شبهه‌سازی شده و نتایج آن با اطلاعات مندرج در نقشه عملیاتی واحد، مقایسه شده است. ضمناً پارامترهای عملیاتی مؤثر در فرایند تولید اولفین به روش کراکینگ با بخار آب مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهند که محاسبات نرم‌افزاری دارای حداقل خطا بوده‌اند.

کلمات کلیدی: اولفین، اتیلن، کراکینگ، شبهه‌سازی، نرم افزار HYSYS

۱- مقدمه

وجود عواملی چون ارزانی مواد اولیه، ارزش افزوده فرآورده‌ها و گسترش فراوان محصولات پلیمری در حیطه زندگی بشری باعث افزایش تمایل واحدهای بنیادی صنایع پتروشیمی مانند واحد اولفین و واحد آروماتیک برای تولید ترکیبات پایه به عنوان خوراک واحدهای پلیمری شده و فرایندهای متنوعی برای بهبود کیفیت و کاهش هزینه تولید این محصولات ارائه شده است. گاز طبیعی و برش‌های نفتی حاصل از تفکیک اولیه نفت خام، حاوی هیدروکربن‌های سیرشده بوده و دارای فعالیت شیمیایی متوسط هستند که مانع گسترش تولید محصولات متنوع و مرکب شده‌اند. این نقصان با گسترش استفاده از هیدروکربن‌های سیرنشده آلیفاتیکی مانند اولفین‌ها که دارای پتانسیل فعالیت بیشتری می‌باشند قابل جبران است. هدف از این مقاله بررسی روش‌های تولید

ترکیبات اولفینی بر پایه اتان و مقایسه آن با فرایندهای خوراک مایع است. در این بررسی به کمک نرم‌افزار شبهه‌ساز HYSYS مقایسه داده‌های فرایندی با نتایج به دست آمده از تجهیزات شبهه‌سازی به طور کامل انجام شده است. این مقایسه زمینه انجام تحقیقات بهینه‌سازی و اقتصادی‌تر کردن فرایند را فراهم خواهد نمود [۱].

۲- انواع فرایندهای تولید اولفین

تا اواخر جنگ جهانی دوم روش‌های تولید اولفین محدود به مایع کردن و تفکیک گازهای کوره کک‌پزی، آب‌گیری از الکل اتیلیک و هیدروژن‌دار کردن جزئی استیلن می‌شد. با افزایش تقاضا برای اتیلن، جهت‌گیری تولید به سمت تجزیه حرارتی اجزای نفتی (گازهای سبک، نفتا، گازوئیل) سوق پیدا کرد. به دلیل سودآوری کلان تولید ترکیبات پایه اولفینی در صنعت کشورها، شرکت‌های

از بوتادیان، جریان بنزین C_6-C_8 غنی از آروماتیکها و نفت کوره می‌شود.

جدول ۲- مقایسه پارامترهای اقتصادی چند لیسانس مهم تولید اولفین [۲]

ردیف	صاحب لیسانس	بازدهی تولید اتیلن	محصولات جانبی	مصرف انرژی Kcal/kg (Ethylene)	سهم تولید جهانی
۱	لینده	۸۳٪، ۳۵٪، ۲۵٪	پروپیلن، بوتادیان	۳۸۰۰،۵۴۰۰	۱۵ میلیون تن
۲	لوموس	۷۵٪، ۳۵٪، ۲۸٪	پروپیلن، بوتادیان	۳۳۰۰،۵۰۰۰	۴۰٪ تولید جهانی
۳	تکنیپ	۵۸٪، ۳۹٪، ۲۲٪	پروپیلن، بوتادیان، آروماتیکها	۵۹۰۰،۳۰۰۰	۴۵۰ واحد اولفین
۴	استون براون	۵۷٪، ۳۴٪، ۲۸٪	پروپیلن، بوتادین	۳۰۰۰،۶۰۰۰	۱۲۰ واحد اولفین

خوراک تازه و جریان‌های برگشتی مطابق شکل (۱) در حضور بخار رقیق‌کننده در کوره‌هایی از نوع هیدروکراک^۲، پیش‌گرم و تفکافت می‌شوند. جریان خروجی کوره در مبدل‌های TLE^۳ با تولید بخار فشار قوی خنک می‌شود. جریان ترکیبی گاز شکسته شده در برج تقطیر اولیه (۳) و برج سردکننده (۴) توسط آب، خنک شده و خالص می‌شود. گرمای اضافی توسط یک چرخه روغن بازیافت می‌گردد تا گرمای جوش آورها و گرم کن‌های فرایند تأمین شود. گاز خالص خروجی از برج سردکننده دفعاتاً در یک کمپرسور ۴ الی ۵ مرحله‌ای فشرده شده و در جذب کننده‌های سطحی گاز و مایع خشک می‌گردد. CO_2 و H_2S گاز کراکینگ در یک سیستم شستشو با سود سوزآور که قبل از آخرین مرحله کمپرسورها قرار داده شده است، از

۱. بازدهی تولید اتیلن به ترتیب از راست به چپ برای خوراک اتان، نفتا و گازوئیل می‌باشد.

۲. مصرف انرژی به ترتیب از راست به چپ برای خوراک اتان و نفتا می‌باشد.

3. Hydrocrack
4. Transfer Line Exchanger

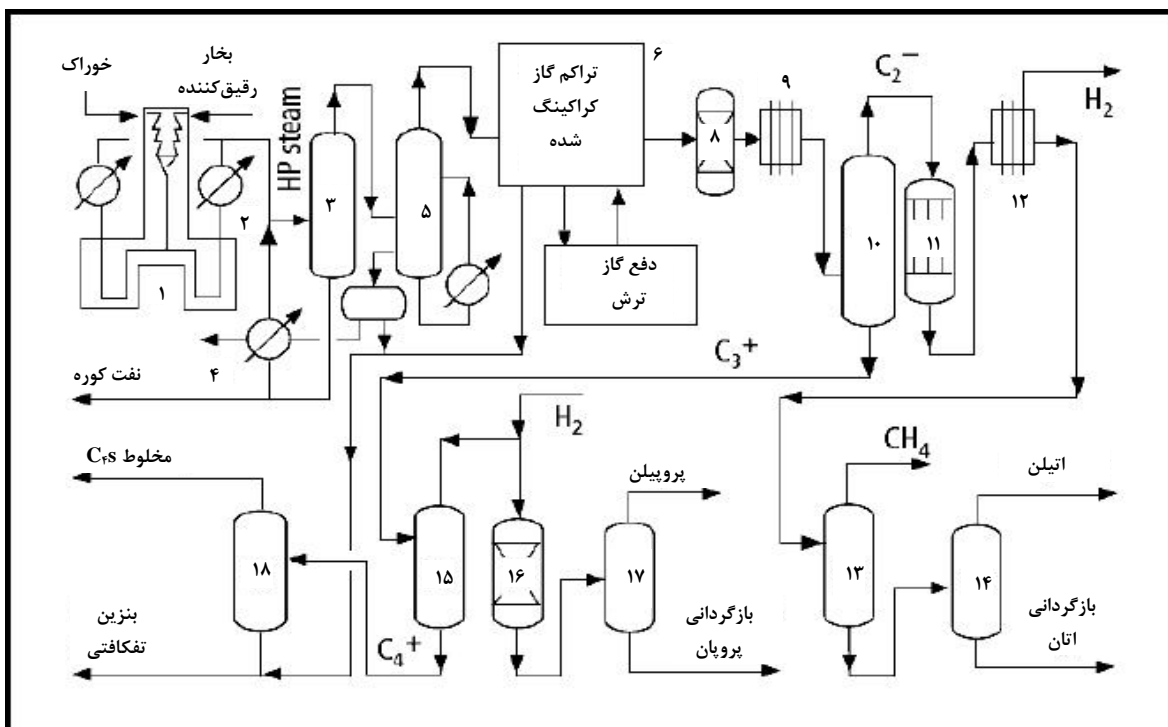
متعددی پا به این عرصه گذارده‌اند و به تبع موجودیت منابع اولیه و سودآوری، روش‌های اختصاصی در این زمینه ابداع شده‌اند. از مهمترین این شرکت‌ها می‌توان به شرکت‌های تکنیپ، گلوبال اس آر تی، (کلوگ براون - روت)، (استون - وبستر) و لینده اشاره کرد. تمامی این فرایندها شامل دو بخش کلی کراکینگ حرارتی و جداسازی مواد هیدروکربنی بوده‌اند که بر حسب نوع خوراک، جزئیات فرایندی آنها متفاوت است [۱].

جدول ۱- معرفی پتروشیمی‌های ایران بر حسب نوع خوراک و لیسانس خریداری شده [۱]

ردیف	نام واحد	خوراک واحد	صاحب لیسانس	سال بهره برداری
۱	پتروشیمی آبادان	نفتا	شرکت لوموس	۱۳۴۸
۲	پتروشیمی بندر امام	نفتا	شرکت لوموس	۱۳۷۲
۳	پتروشیمی اراک	نفتا	شرکت تکنیپ	۱۳۷۲
۴	پتروشیمی تبریز	نفتا	شرکت تکنیپ	۱۳۷۵
۵	پتروشیمی امیرکبیر	اتان	شرکت لینده	۱۳۸۴
۶	پتروشیمی مارون	اتان	شرکت لینده	۱۳۸۵
۷	پتروشیمی آریا ساسول	اتان	شرکت تکنیپ	۱۳۸۶
۸	پتروشیمی جم	اتان	شرکت تکنیپ	۱۳۸۶
۹	پتروشیمی ایلام	اتان	شرکت استون	۱۳۸۸-۸۹

۳- فرایند تولید اولفین به روش کراکینگ اتان تحت لیسانس لینده

تولید اتیلن و پروپیلن با عیار پلیمری از کراکینگ حرارتی برش‌های هیدروکربنی (از اتان تا نفتا و مواد باقی مانده در هیدروکراک) حاصل می‌شود. محصولات جانبی این فرایند، شامل جریان C_4 غنی



شکل ۱- طرح اجمالی فرایند تولید اولفین به روش کراکینگ اتان با بخار آب [۳]

متناظر، در دماهای بالاتر پایدار هستند. این موضوع در شکل (۲) نشان داده شده است. این نمودار تغییرات انرژی آزاد تشکیل گیسیس را به صورت تابعی از دما نسبت به تعداد اتم‌های کربن که شاخص عددی ترکیبات هیدروکربنی است نشان می‌دهد. در این نمودار، در یک دمای معین، یک ماده نسبت به تمام ترکیبات و عناصر هیدروژن و کربن که نقطه نشانگرشان زیر نقطه نشانگر آن ماده قرار دارد ناپایدار است. از اینرو تشکیل آن ماده از این ترکیبات یا عناصر، نیاز به دریافت انرژی دارد. به همین دلیل هیدروکربن‌ها نسبت به عناصرشان در هر دمایی پایدار هستند به جز متان که در دماهای متوسط و پایین پایدار است [۴].

۶- شاخص‌های سینتیکی

واکنش‌های کراکینگ تنها در دماهای بالای 700°C به سرعت کافی می‌رسند و به همین دلیل زنجیره فرایندهای هیدروژن زدایی در دماهای بالای 800 الی 850 درجه سلسیوس قابل مشاهده‌اند. همچنین فرایندهای تشکیل هیدروکربن‌های پلی آروماتیک و کک نیز محدود به دماهای بالای 900 الی 1000 درجه سلسیوس می‌شوند.

جریان زدوده می‌شوند. گاز کراکینگ شده، کمپرس، و پس از خنک شدن، به فرایند بازیافت فرستاده می‌شود. قسمت بازیافت به ترتیب شامل اتان زدا، راکتور هیدروژن‌دار کردن تکدما، قسمت سردساز، متان زدا و برج جداکننده اتیلن در فشار پایین می‌باشد. جریان C_3^+ خروجی از پایین اتان‌زدا، با پروپان‌زدایی و هیدروژن‌دار کردن مناسب پروپیلن برای تهیه پلیمر بازیافت می‌گردد. در بوتان‌زدا ترکیبات C_4 از ترکیبات سنگین‌تر جدا می‌شوند تا محصول خام C_4 و یک جریان C_5 را که وقتی با هیدروکربن‌های مایع شده خروجی از قسمت داغ ترکیب شود محصول بنزین را بوجود آورد، بازیافت شوند [۳].

۴- اصول کراکینگ با بخار آب

در فرایند کراکینگ با بخار آب، تجزیه حرارتی هیدروکربن‌های سیر شده (گاز طبیعی تا برشهای نفتی) در حضور بخار آب انجام می‌گیرد. پیش از پرداختن به مطالعه فناوری این واحدها، لازم است که خواص فیزیکی و شیمیایی واکنش‌ها (هیدروژن زدایی، تفکافت) مورد بررسی قرار گیرد [۴].

۵- ملاحظات ترمودینامیکی

هیدروکربن‌های سیر نشده در مقایسه با هیدروکربن‌های سیر شده

استفاده از کاتالیزگرهای با ترکیب نامعلوم بر پیچیدگی فهم و شبیه‌سازی این واحد افزوده است.

مصرف بسیار زیاد انرژی در این واحد و تاثیر گذاری ترکیب درصد خروجی کوره در بهینه کردن ادامه فرایند، لزوم انتخاب کاتالیزگرهای مناسب را که در شرایط کوره بازدهی مناسب داشته و توانایی هدایت واکنش‌های داخل کوره به سمت محصولات مطلوب^۱ را دارا باشند حساس تر می‌کند.

این امر باعث شده است تا شرکت‌های مختلف با تحقیقات خاص خود، برآوردهای متنوعی از فرایند انجام واکنش‌ها در کوره و تهیه شرایط فرایندی آن ارائه دهند.

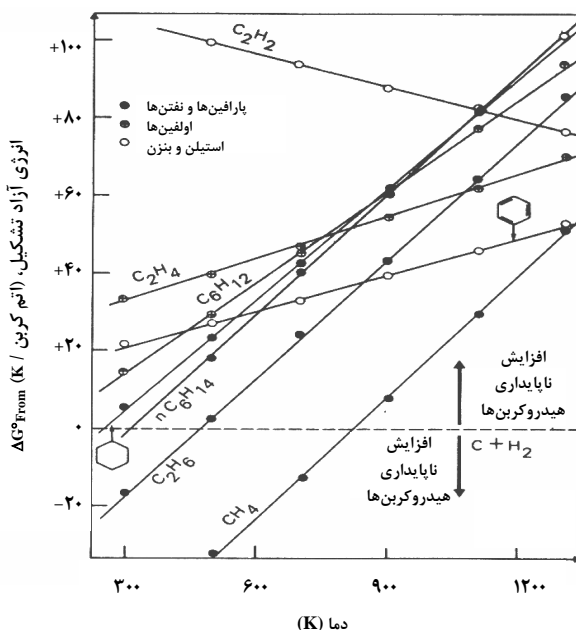
در جدول (۳) مشخصات سینتیکی تمامی واکنش‌هایی که امکان انجام دارند، به روش آزمایشگاهی محاسبه و ارائه شده‌اند. این واکنش‌ها برای کوره کراکینگ اتان تخمین زده شده‌اند.

۸- متغیرهای عملیاتی کوره تفکافت

در راکتور تفکافت که محل انجام واکنش‌های گازی است متغیرهای اصلی عملیات عبارتند از: دما که تعیین کننده میزان فعالیت سیستم است، زمان ماند که به مخلوط واکنش اجازه می‌دهد تا به شرایط عملیاتی انتخابی برسد، فشار و مقدار واکنش‌کننده‌ها در خوراک که توسط فشار جزئی هیدروکربن‌ها مشخص می‌گردد [۶].

۸-۱ دمای واکنش

در داخل یک لوله کوره، خوراک نمی‌تواند به طور آبی به دمای واکنش برسد و دما در طول لوله با توزیع مشخص تغییر می‌کند. در شکل (۳) توزیع دما برای سه دمای خروجی ۸۰۵، ۸۱۵ و ۸۲۵ درجه سلسیوس نشان داده شده است. محور افقی مستقیماً نشان دهنده طول لوله نیست بلکه بر حسب تعداد کویل‌ها می‌باشد (قسمتی از لوله عمودی بین دو نقطه ثابت). تغییر شیب نمودار در دمای حدود ۷۰۰ °C بیانگر آغاز واکنش‌های کراکینگ است. قسمت اول لوله تفکافت صرفاً دمای خوراک هیدروکربنی را تا حداقل دمای مورد نیاز برای انجام واکنش افزایش می‌دهد. این دما با استفاده از داده‌های سینتیکی تبدیل به دست آمده است [۶].



شکل ۲- پایداری ترمو دینامیکی هیدروکربن‌ها [۴]

افزایش زمان ماند و دمای واکنش به هدف تولید اولفین‌های سبک باعث افزایش نامطلوب تولید مشتقات آروماتیکی سنگین خواهد شد. به دلیل فعالیت ذاتی ترکیبات آلیفاتیک سیرنشده (اولفین‌ها، دی اولفین‌ها و مشتقات استیلنی) سرعت واکنش بسیارش آنها، حتی در دماهای پایین زیاد است.

واکنش تفکافت با یک رادیکال آزاد و یک مکانیسم زنجیری پیش می‌رود که توسط اف-ا-ا- رایس ارائه شده است. شروع واکنش با شکستن متجانس پیوند (C-C) انجام می‌گیرد که منجر به تولید رادیکال آزاد می‌گردد. رادیکال‌ها واکنش‌های زنجیری را با جدا کردن یک اتم هیدروژن از هیدروکربن‌ها پیش می‌برند و یک رادیکال آزاد تولید می‌نمایند [۵].

۷- فرایندهای شیمیایی کوره

در تمامی واحدهای پتروشیمی، اولفین به عنوان تأمین‌کننده خوراک واحدهای دیگر عمل می‌کند و در این واحد، بخش کراکینگ از اهمیت خاصی برخوردار است.

شاید یکی از دلایل این اهمیت، وجود تجهیزات کوره کراکینگ و ناشناخته بودن مکانیزم تفکافت در این واحد می‌باشد. انجام واکنش‌های بی‌شمار در فرایند شکستن مولکول‌های سنگین و تنظیم پارامترهای فرایندی مانند دما و فشار فرایند و نیز

جدول ۳- واکنش‌های انجام شده در کوره بر اساس اطلاعات آزمایشگاهی [۶]

نوع واکنش	$k_{1050} \text{ (s}^{-1}, \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1})$	$E \text{ (kJ mol}^{-1})$	نوع واکنش	$k_{1050} \text{ (s}^{-1}, \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1})$	$E \text{ (kJ mol}^{-1})$
هیدروژن‌دار کردن					
$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$	6.7×10^{-1}	191	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow 1,3\text{-C}_3\text{H}_8 + \text{H}_2$	1.7×10^{-4}	204
$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_8$	2.0×10^{-2}	340	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{C}_3\text{H}_6 \rightarrow 1,4\text{-C}_6\text{H}_{10} + \text{H}_2$	2.4×10^{-2}	204
$1\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{H}_2 \rightarrow n\text{-C}_4\text{H}_{10}$	1.0×10^{-1}	340	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{C}_3\text{H}_6 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{CH}_4 + \text{H}_2$	9.9×10^{-2}	204
$2\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{H}_2 \rightarrow n\text{-C}_4\text{H}_{10}$	9.8×10^{-2}	340	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{C}_4\text{H}_6 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$	1.2×10^{-2}	204
$i\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{H}_2 \rightarrow i\text{-C}_4\text{H}_{10}$	2.5×10^0	340	$\text{C}_2\text{H}_4 + i\text{-C}_4\text{H}_8 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{C}_5\text{H}_7 + \text{H}_2$	5.0×10^{-4}	204
$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4$	8.5×10^{-3}	278	$1,3\text{-C}_3\text{H}_8 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{H}_2$	9.7×10^0	35
$\text{C}_3\text{H}_4 + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6$	1.1×10^{-1}	278	$1,4\text{-C}_3\text{H}_8 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{H}_2$	2.9×10^{-2}	35
$\text{C}_4\text{H}_6 + \text{H}_2 \rightarrow 1\text{-C}_4\text{H}_8$	1.0×10^0	278	$(\text{CH}_3)\text{-C}_3\text{H}_7 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{CH}_4$	5.8×10^{-2}	35
Amortisation					
$\text{C}_4\text{H}_6 + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_6\text{H}_6 + 2\text{H}_2$	1.4×10^0	116			
$\text{C}_4\text{H}_6 + \text{C}_3\text{H}_6 \rightarrow (\text{CH}_3)\text{-C}_6\text{H}_5 + 2\text{H}_2$	9.7×10^{-1}	116			
$\text{C}_4\text{H}_6 + 1\text{-C}_4\text{H}_8 \rightarrow (\text{C}_2\text{H}_5)\text{-C}_6\text{H}_5 + 2\text{H}_2$	4.4×10^{-2}	116			
$\text{C}_4\text{H}_6 + \text{C}_4\text{H}_6 \rightarrow (\text{C}_2\text{H}_3)\text{-C}_6\text{H}_5 + 2\text{H}_2$	1.5×10^{-1}	116			
$\text{C}_4\text{H}_6 + 2\text{-C}_4\text{H}_8 \rightarrow (\text{CH}_3)_2\text{-C}_6\text{H}_4 + 2\text{H}_2$	6.2×10^{-2}	116			
$\text{C}_4\text{H}_6 + \text{C}_6\text{H}_6 \rightarrow \text{C}_{10}\text{H}_8 + \text{H}_2$	1.1×10^0	116			
$\text{C}_5\text{H}_8 + \text{C}_4\text{H}_6 \rightarrow (\text{C}_3\text{H}_5)\text{-C}_6\text{H}_5 + 2\text{H}_2$	2.4×10^{-2}	116			
همپاراش					
$1\text{-C}_4\text{H}_8 \rightarrow 2\text{-C}_4\text{H}_8$	6.0×10^{-2}	42			
$2\text{-C}_4\text{H}_8 \rightarrow 1\text{-C}_4\text{H}_8$	1.7×10^0	32			
واکنش‌های معمولی					
$\text{C}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$	2.7×10^0	340			
$\text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2$	1.2×10^{-1}	207			
$\text{C}_3\text{H}_6 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_4 + \text{H}_2$	1.1×10^{-2}	207			
$\text{C}_3\text{H}_8 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{CH}_4$	1.4×10^{-1}	237			
$\text{C}_3\text{H}_8 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{H}_2$	2.8×10^0	227			
$n\text{-C}_4\text{H}_{10} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{C}_2\text{H}_6$	2.1×10^0	237			
$n\text{-C}_4\text{H}_{10} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{CH}_4$	2.8×10^0	227			
$n\text{-C}_4\text{H}_{10} \rightarrow 2\text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$	2.1×10^{-2}	305			
$n\text{-C}_4\text{H}_{10} \rightarrow 1\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{H}_2$	2.1×10^{-2}	207			
$i\text{-C}_4\text{H}_{10} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{CH}_4$	1.9×10^{-1}	237			
$1\text{-C}_4\text{H}_{10} \rightarrow i\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{H}_2$	9.1×10^0	218			
$1\text{-C}_4\text{H}_8 \rightarrow \text{C}_4\text{H}_6 + \text{H}_2$	1.5×10^{-1}	195			
$1\text{-C}_4\text{H}_8 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{C}_2\text{H}_4$	4.4×10^{-3}	237			
$i\text{-C}_4\text{H}_8 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_4 + \text{CH}_4$	3.1×10^0	207			
$1,3\text{-C}_3\text{H}_8 + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{C}_2\text{H}_4$	9.7×10^0	35			
$1,4\text{-C}_3\text{H}_8 + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{C}_2\text{H}_4$	2.9×10^{-2}	35			
$1,4\text{-C}_6\text{H}_{10} + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{C}_3\text{H}_6$	3.0×10^{-1}	35			
$(\text{CH}_3)\text{-C}_6\text{H}_5 + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_6\text{H}_6 + \text{CH}_4$	2.4×10^{-2}	35			
$(\text{CH}_3)_2\text{-C}_6\text{H}_4 + \text{H}_2 \rightarrow (\text{CH}_3)\text{-C}_6\text{H}_5 + \text{CH}_4$	1.7×10^0	35			
$(\text{CH}_3)_3\text{-C}_6\text{H}_3 + \text{H}_2 \rightarrow (\text{CH}_3)_2\text{-C}_6\text{H}_4 + \text{CH}_4$	3.5×10^{-5}	35			
$(\text{CH}_3)_4\text{-C}_6\text{H}_2 + \text{H}_2 \rightarrow (\text{CH}_3)_3\text{-C}_6\text{H}_3 + \text{CH}_4$	5.2×10^{-2}	35			
$2\text{-}(\text{CH}_3)\text{-}1,3\text{-C}_4\text{H}_5 + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{C}_2\text{H}_4$	2.1×10^{-1}	35			
$2\text{-}(\text{CH}_3)\text{-}2\text{-C}_4\text{H}_7 + \text{H}_2 \rightarrow 2\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{CH}_4$	1.3×10^{-2}	35			
$\text{C}_4\text{H}_6 + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{C}_2\text{H}_4$	2.4×10^{-2}	63			
$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{CH}_4$	4.6×10^{-1}	211			
$i\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{CH}_4$	1.4×10^{-2}	211			
$1\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{CH}_4$	3.3×10^{-1}	211			
$2\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{CH}_4$	1.2×10^{-1}	211			
$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{CH}_4 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{H}_2$	3.2×10^0	204			
$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{CH}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{C}_2\text{H}_6$	1.1×10^{-3}	204			
$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{CH}_4 \rightarrow 1\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{H}_2$	7.8×10^{-2}	204			
$1\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{CH}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{C}_3\text{H}_8$	1.2×10^{-2}	204			
$2\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{CH}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6 + \text{C}_3\text{H}_6$	2.0×10^{-2}	204			
$i\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{CH}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{C}_3\text{H}_8$	3.0×10^{-2}	204			
$\text{C}_4\text{H}_6 + \text{CH}_4 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{C}_2\text{H}_4$	3.2×10^{-2}	63			
$\text{CH}_4 + \text{CH}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + 2\text{H}_2$	2.1×10^{-4}	204			
$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{C}_2\text{H}_2 \rightarrow \text{C}_5\text{H}_6 + \text{H}_2$	4.6×10^{-2}	116			
$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{CH}_4$	3.3×10^{-2}	211			
$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_4\text{H}_6$	1.7×10^0	211			

زمان ماند برای خوراک‌های سنگین نسبت به خوراک‌های سبک، طولانی‌تر است و به همین دلیل در کراکینگ اتان، پروپان و همچنین بوتان اختلاف بازدهی محصول بر حسب تفاوت زمان ماند (حدود ۰,۲ تا ۱,۲ ثانیه) ناچیز است.

از لحاظ نظری می‌توان گفت زمان‌های ماند کوتاه‌تر انتخاب‌گری را نسبت به اتیلن و پروپیلن بهبود می‌بخشد. اما در عمل، شماری از عوامل تکنیکی و اقتصادی (مقاومت مواد، هزینه سوخت کوره و عوامل دیگر) ایجاب می‌کند که حد پایینی زمان ماند کمتر از ۰/۲ ثانیه نباشد [۷].

۳-۸ فشار جزئی هیدروکربن و نقش بخار آب

از نقطه نظر ترمودینامیکی واکنش‌های تفکافت (کراکینگ و هیدروژن‌زدایی) برای تولید اولفین‌های سبک در فشار پایین پیشرفت بیشتری دارند. به ویژه هنگامی که واکنش‌های تراکمی به شدت مضر باشند. از این رو به واسطه افت فشارهای ذاتی در جریان مخلوط واکنش توسط بخار آب، فشار خروجی لوله‌های کوره نزدیک به فشار اتمسفری است.

بخار آب گذشته از این نقش سینتیکی خاص، اثرات سودمند دیگری نیز به ترتیب زیر اعمال می‌کند:

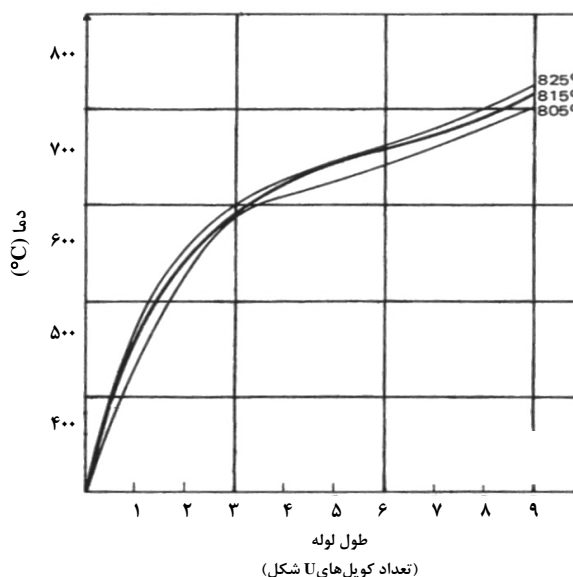
الف) ورود گرما از طریق تزریق بخار آب به خوراک
ب) کمک به کک‌زدایی در لوله‌های کوره از طریق واکنش با بخار آب:

استفاده از بخار آب دارای محدودیت‌هایی نیز می‌باشد که از عمده‌ترین آنها می‌توان به موارد زیر اشاره کرد:

الف) از آن‌جا که بخار آب باید تا دمای واکنش گرم شود، حضور آن حجم واکنش و در نتیجه هزینه‌های کوره را افزایش می‌دهد.
ب) جداسازی آن از محصولات هیدروکربنی، سطح میعان عظیمی لازم دارد که به مصرف تجهیزات جانبی بیشتری منجر می‌گردد [۷].

۴-۸ کک‌زدایی و مدت زمان عملکرد واحد

با وجود تمامی پیش‌بینی‌های انجام شده برای به حداقل رساندن تشکیل کک در لوله‌های کوره و دیگ کونچ، حذف کامل آن غیرممکن است. عملیات کوره باید برای زدودن کک، به طور متناوب قطع شود که این عملیات را کک‌زدایی می‌نامند.



شکل ۳- توزیع دما در یک لوله تفکافت [۴]

دمای عملیاتی واکنش برای اتان در محدوده ۸۰۰ الی ۸۵۰ درجه سلسیوس قرار می‌گیرد. در حالی که برای هیدروکربن‌های سیرشده سنگین مانند گازوئیل به دلیل فعالیت درونی زیادشان عملیات در دمای ۱۰۰ °C پایین‌تر انجام می‌پذیرد. [۶]

۲-۸ زمان ماند

به دلیل گرادیان شدید دمایی در طول لوله‌های تفکافت، به کار بردن مفهوم دقیق زمان ماند دشوار است. یک راه حل مناسب، تعریف زمان ماند معادل است. این زمان ماند در یک راکتور تک‌دما تعریف می‌شود و دمای آن با دمای خروجی لوله یکسان است. در یک راکتور تک‌دما رابطه میزان تبدیل خوراک با زمان ماند بر طبق معادله زیر داده می‌شود:

$$\ln \frac{1}{1-X_f} = k_1 \theta \quad (1)$$

در این رابطه، X_f درصد تبدیل خوراک، k_1 ثابت سرعت واکنش درجه اول در دمای عملیاتی راکتور و θ زمان ماند می‌باشد. زمان ماند به عنوان تابعی از طراحی کوره به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\theta = \frac{V}{D} \quad (2)$$

که در آن V حجم راکتور و D دبی حجمی خوراک است.

زمان ماند اضافی در دمای زیاد، اهمیت دارد. گرمای کوره ابتدا در دیگ کوئنچ، به طرز سرد کردن غیرمستقیم، و سپس، با وارد کردن جریان برگشتی هیدروکربن‌های سنگین که روغن کوئنچ نامیده می‌شود، به طور مستقیم، بازیابی می‌گردد [۷].

۹- اثر نوع خوراک بر عملکرد واحد

خوراک‌های متنوع وسیعی جهت تفکافت استفاده می‌شود و دامنه آنها از هیدروکربن‌های اشباع سبک از قبیل اتان، پروپان و حتی مخلوط اتان و پروپان تا برش‌های سنگین نفت خام از قبیل نفتای پتروشیمی و گازوئیل سبک و سنگین تغییر می‌کند. از این رو روشن است که استفاده از هیدروکربن‌های سبک در ایران که از لحاظ منابع گازهای طبیعی (متان، اتان و پروپان) غنی است اقتصادی‌تر به نظر می‌رسد و در مقابل، کشورهای اروپایی و ژاپن، برش‌های نفت خام را به عنوان خوراک کراکینگ به کار می‌برند [۲].

در شرایط ایده آل، یک کوره تفکافت می‌تواند تا ۹۰ روز بدون انجام عملیات کک‌زدایی کار کند ولی مدت عملکرد همیشه، به علت رسوب اجتناب‌ناپذیر در دیگ‌های کوئنچ، کوتاه‌تر است. پیشرفت رسوب کک در لوله‌های تفکافت، منجر به افزایش دمای پوسته فلزی لوله می‌شود که در ارتباط با کاهش بازدهی انتقال حرارت می‌باشد و نیز به علت کاهش قطر لوله، افت فشار افزایش می‌یابد [۷].

۵-۸ کوئنچ

دیگ‌های کوئنچ در عمل مبدل‌هایی هستند^۱ که به شکل عمودی در خروجی لوله‌های تفکافت قرار گرفته‌اند. محصولاتی که ناحیه تابش کوره را ترک می‌کنند باید سریعاً سرد شوند. این عملیات خصوصاً برای جلوگیری از تغییر ترکیب جریان خروجی از طریق تشکیل محصولات پلیمری سنگین و افزایش در مقدار بنزین انجام می‌گیرد. کوتاه بودن خط انتقال بین کوره و دیگ کوئنچ برای جلوگیری از

جدول ۴- عملکرد دیگ کوئنچ در کراکینگ با بخار آب [۴]

خوراک	دمای گاز کراکینگ در خروجی دیگ (°C)		مشخصات بخار آب تولید شده	
	۳۲۰-۳۷۰	۴۲۵-۴۵۰	فشار (MPas)	دما (°C)
اتان	۳۲۰-۳۷۰	۴۲۵-۴۵۰	۴-۴۵	۲۵۲-۲۶۰
نفتا	۳۲۰-۳۷۰	۴۲۵-۴۵۰	۸-۱۰	۲۹۷-۳۱۳
گازوئیل سبک اتمسفری	۳۲۰-۳۷۰	۴۲۵-۴۵۰	۸-۱۲,۵	۲۹۷-۳۲۹
گازوئیل سنگین اتمسفری	۳۲۰-۳۷۰	۴۲۵-۴۵۰	۱۰-۱۳,۵	۳۱۳-۳۳۵

جدول ۵- تأثیر خوراک بر بازدهی محصولات کراکینگ با بخار آب (درصد وزنی) [۴]

محصولات	خوراک					
	اتان	پروپان	بوتان	تفنا	گازوئیل	گازوئیل حاصل از برج تقطیر در خلاء
هیدروژن (۹۵ درصد حجمی)	۸/۸	۲/۳	۱/۶	۱/۵	۰/۹	۰/۸
متان	۶/۳	۲۷/۵	۳۲/۰	۱۷/۲	۱۱/۲	۸/۸
اتیلن	۷۷/۸	۴۲/۰	۴۰/۰	۳۳/۶	۲۶/۰	۲۰/۵
پروپیلن	۲/۸	۱۶/۸	۱۷/۳	۱۵/۶	۱۶/۱	۱۴/۰
بوتان دیان	۱/۹	۳/۰	۳/۵	۲/۵	۴/۵	۵/۳
سایر ترکیبات C ₄	۰/۷	۱/۳	۶/۸	۴/۲	۴/۸	۶/۳
بنزین C ₅ -200	۱/۷	۶/۶	۷/۱	۱۸/۷	۱۸/۴	۱۹/۳
بنزن	۰/۹	۲/۵	۳/۰	۶/۷	۶/۰	۳/۷
تولون	۰/۱	۰/۵	۰/۸	۳/۴	۲/۹	۲/۹
ترکیبات آروماتیکی C ₈	---	---	۰/۷	۱/۸	۲/۲	۱/۹
ترکیبات غیرآروماتیکی	۰/۷	۳/۶	۲/۹	۶/۸	۴/۳	۱۰/۸
نفت کوره	---	۰/۵	۱/۷	۴/۷	۱۸/۱	۲۵/۰

1. TLX

۱۰- جنبه‌های اقتصادی کراکینگ با بخار آب

اگرچه در ابتدا کراکینگ با بخار آب برای تولید اتیلن طراحی شده بود ولی استفاده از آن به لحاظ اقتصادی هنگامی مطرح شد که تمام هیدروکربن‌های حاصل به صورت محصولات میانی پتروشیمی تخلیص شدند. از اینرو، اتان برای تولید حجم وسیع اتیلن به کار برده می‌شود و در مورد پروپان تولید اتیلن و پروپیلن مدنظر است. در مقابل در مورد برش‌های نفتی مایع (نفتا و گازوئیل) برای تولید اتیلن، پروپیلن، بوتن‌ها، بوتادی‌ان و بنزین آروماتیکی سودمند می‌باشد. [۴].

۱۱- نتایج و فرضیات شبیه‌سازی

یکی از کاربردهای مؤثر کامپیوتر در صنایع نفت، گاز و پتروشیمی، شبیه‌سازی واحدهای تولیدی به وسیله نرم‌افزارهای شبیه‌ساز است. این زمینه با توجه به وجود زمینه رقابتی بازارهای جهانی و نیز

اقداماتی که در زمینه افزایش بهره‌وری تولید و کاهش هزینه‌ها انجام گرفته طی سال‌های اخیر با رشد استقبال این صنایع مواجه بوده است.

منظور از مدل‌سازی فرایند، توصیف ماهیت سیستم تولید (موازنه‌های جرم و انرژی) در قالب معادلات ریاضی است. خصوصیات اصلی مدل‌های مناسب، دقیق بودن، کمی بودن و مختصر بودن آنها است. این معادلات عموماً ناخطی و به شکل معادلات جبری، دیفرانسیلی و یا ترکیبی از این دو هستند.

در مقابل شبیه‌سازی، یعنی به دست آوردن اطلاعات خروجی (مانند مشخصات محصول) از طریق حل مدل‌های فوق بر اساس اطلاعات ورودی (مانند مشخصات خوراک)، در این میان، اطلاعات مربوط به مشخصات دستگاه، جزئی از مدل به شمار می‌رود و قسمتی از آنها توسط کاربر به نرم‌افزار داده می‌شود.

جدول ۶- توزیع سرمایه‌گذاری در قسمت‌های مختلف تأسیسات کراکینگ با بخار آب [۴]

قسمت‌های مختلف	خوراک		
	اتان	نفتا	گازوئیل
کوره تفکافت	۳۰	۳۵	۴۰
تفکیک اولیه	۸	۱۰	۱۲
تراکم، شستشو و خشک کردن	۲۰	۱۸	۱۶
متان‌زدایی	۱۰	۸	۷
جداسازی برش C ₂ و تفکیک آن ^(۱)	۱۰	۷	۷
تیرید	۲	۴	۴
	۲۰	۱۸	۱۴
مجموع	۱۰۰	۱۰۰	۱۰۰

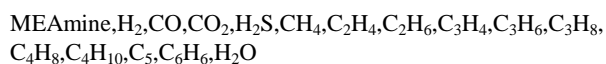
جدول ۷- مقایسه هزینه‌های جانبی واحد تولید اولفین بر اساس نوع خوراک [۴]

خوراک	اتان	اتان و پروپان (۵۰/۵۰)	نفتای متوسط	گازوئیل برج اتمسفری
سرمایه‌گذاری واحد اصلی ^(۱) (BLI) (10 ^۶ USS)	۲۳۰	۲۵۰	۲۸۰	۳۵۰
مصرف به ازای هر تن از اتیلن مواد شیمیایی				
سود سوراخ (۱۰۰) (kg)	۲	۳	۰/۵	۲
مونو اتانول آمین (kg)	---	---	۰/۲	۱
سایر مواد (USS)	۰/۴	۰/۴	۰/۴	۰/۴
کاتالیستها (USS)	۰/۴	۰/۴	۰/۹	۰/۹
سرویس‌های جانبی بخار آب (t)	۱	۲	۰/۱۵ (-)	۰/۹
سوخت ^(۲) (kJ 10 ^۶)	۱۰ ^(۳)	۴	---	---
الکتریسته (kWh)	۳۰ ^(۳)	۴۰	۸۰	۱۰۰
آب خنک‌کننده (m ^۳)	۲۰۰ ^(۳)	۲۲۰	۲۸۰	۳۰۰
آب فرایند (m ^۳)	۲	۲	۲	۲
پرسنل (متصدی در هر نوبت کار)	۸	۹	۱۲	۱۲

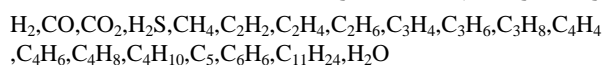
۱-۱۱ فرضیات کلی شبه‌سازی

نرم افزار به کار برده شده (3.2) HYSYS می‌باشد.
الف) ترکیبات انتخاب شده به ترتیب زیر می‌باشند.

برای بخش شیرین سازی:



برای سایر قسمت‌های شبه‌سازی :



ب) در بخش شیرین سازی از معادله حالت بسته آمین^۱ و در سایر قسمت‌ها به دلیل وجود ترکیبات هیدروکربنی و آب از معادله حالت PR^۲ استفاده شده است [۸].

ج) افت فشار در همهی فلش درام‌ها و مبدل‌های حرارتی با توجه به اطلاعات PFD^۳ و فشار جریان‌ها در نظر گرفته شده است.

چ) با توجه به اطلاعات PFD و محاسبه‌ی جرم مولکولی و چگالی و در نظر گرفتن فراریت C₆₊ و (C₆-C₈Aromatic) به ترتیب از مواد (n-C₁₁) و بنزن با تقریب مناسبی به عنوان جایگزین استفاده شده است [۸].

د) تمامی کمپرسورها در حالت عملیاتی آدیاباتیک با بازدهی ۷۵٪ منظور شده‌اند.

ر) در شبه‌سازی کوره‌های کراکینگ بخش گرم، راکتورهای تبدیلی با درصد تبدیلی‌های استخراج شده از PFD به کار گرفته شد.

ه) مبدل‌های LNG برای شبه‌سازی مبدل‌های پره‌ای در نظر گرفته شده‌اند [۹].

و) شبه‌سازی شامل ادواتی مانند صافی‌های جداسازی مواد جامد که تأثیری در نتایج ندارند نمی‌شود.

ی) در بخش شبه‌سازی کوره از واکنش‌های متعددی در راکتورهای تبدیلی استفاده شد که مهم‌ترین آنها در زیر آورده شده‌اند.

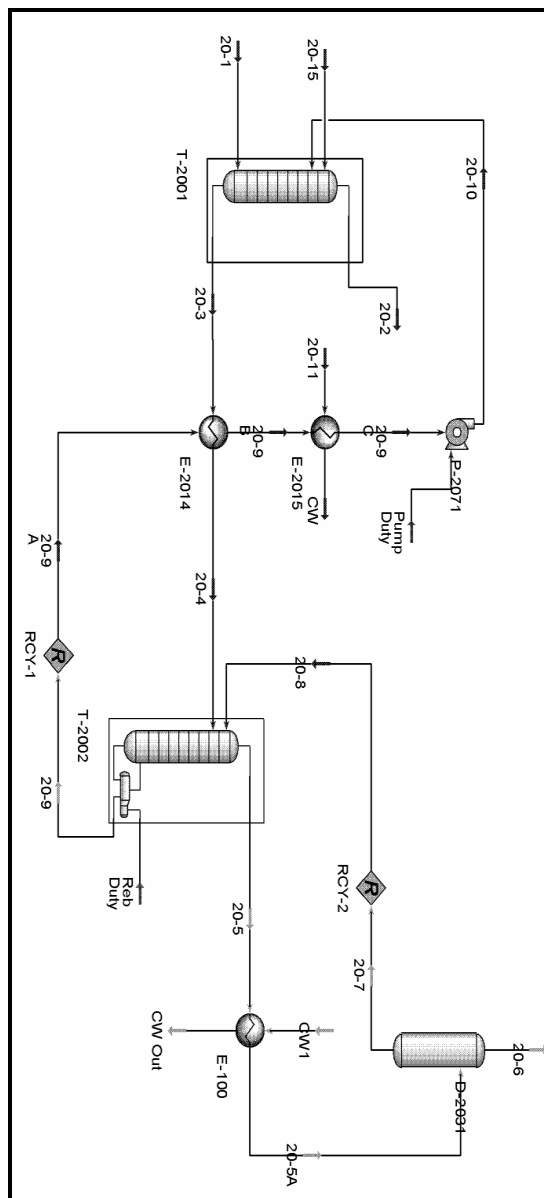
جدول ۸- صورت واکنش‌های وارد شده در راکتورهای تبدیلی نرم‌افزار شبه‌سازی [۶]

ردیف	واکنش	واکنشگر مبنا- درصدتبدیل راکتور ۱	واکنشگر مبنا- درصدتبدیل راکتور ۲
۱	$C_2H_2 + H_2 \rightarrow C_2H_4$	استیلن-۱۰۰	استیلن-۱۰۰
۲	$C_2H_6 \rightarrow C_2H_4 + H_2$	اتان-۵۰	اتان-۵۰
۳	$C_3H_6 \rightarrow C_3H_4 + H_2$	پروپن-۱۶	پروپن-۱۶
۴	$C_3H_3 \rightarrow C_2H_4 + CH_4$	پروپان-۸۰	پروپان-۸۰
۵	$C_3H_3 \rightarrow C_3H_6 + H_2$	پروپان-۴۰	پروپان-۲۰
۶	$C_4H_{10} \rightarrow C_2H_4 + C_2H_6$	ایزوبوتان-۲۰	ایزوبوتان-۲۰
۷	$C_4H_{10} \rightarrow C_3H_6 + CH_4$	ایزوبوتان-۴۵	ایزوبوتان-۳۰
۸	$C_4H_{10} \rightarrow 2C_2H_4 + H_2$	ایزوبوتان-۱۵	ایزوبوتان-۵۰
۹	$C_3H_3 + H_2 \rightarrow C_3H_6 + C_2H_4$	۱۴ پنتادیان-۶۵	۱۴ پنتادیان-۶۵
۱۰	$(n-C_{11}) + H_2 \rightarrow CH_4 + 2C_2H_4 + C_3H_6$	هیدروژن-۱۷,۲۵	(n-C ₁₁)-۲۰
۱۱	$C_3H_6 + H_2 \rightarrow C_2H_4 + CH_4$	پروپن-۵۵	پروپن-۵۵
۱۲	$C_4H_3 + H_2 \rightarrow C_3H_6 + C_2H_4$	۱- بوتن-۴۰	(۱- بوتن)-۴۰
۱۳	$C_2H_6 + C_2H_4 \rightarrow C_3H_6 + CH_4$	اتان-۵۰	اتان-۱,۵
۱۴	$C_4H_3 + CH_4 \rightarrow C_2H_4 + C_3H_3$	۱- بوتن-۱۰	(۱- بوتن)-۱۰
۱۵	$C_2H_4 + CH_4 \rightarrow C_3H_6 + H_2$	اتیلن-۵	اتیلن-۵
۱۶	$C_3H_6 + CH_4 \rightarrow C_4H_3 + H_2$	پروپن-۱۵	پروپن-۱۵
۱۷	$C_4H_3 + CH_4 \rightarrow C_2H_4 + C_3H_3$	۱- بوتن-۱۰	(۱- بوتن)-۱۰

۱۱-۲ بررسی نتایج شبیه‌سازی برای واحدهای فرایندی اصلی

جدول ۹- مقایسه نتایج شبیه‌سازی برای واحد شیرین‌سازی

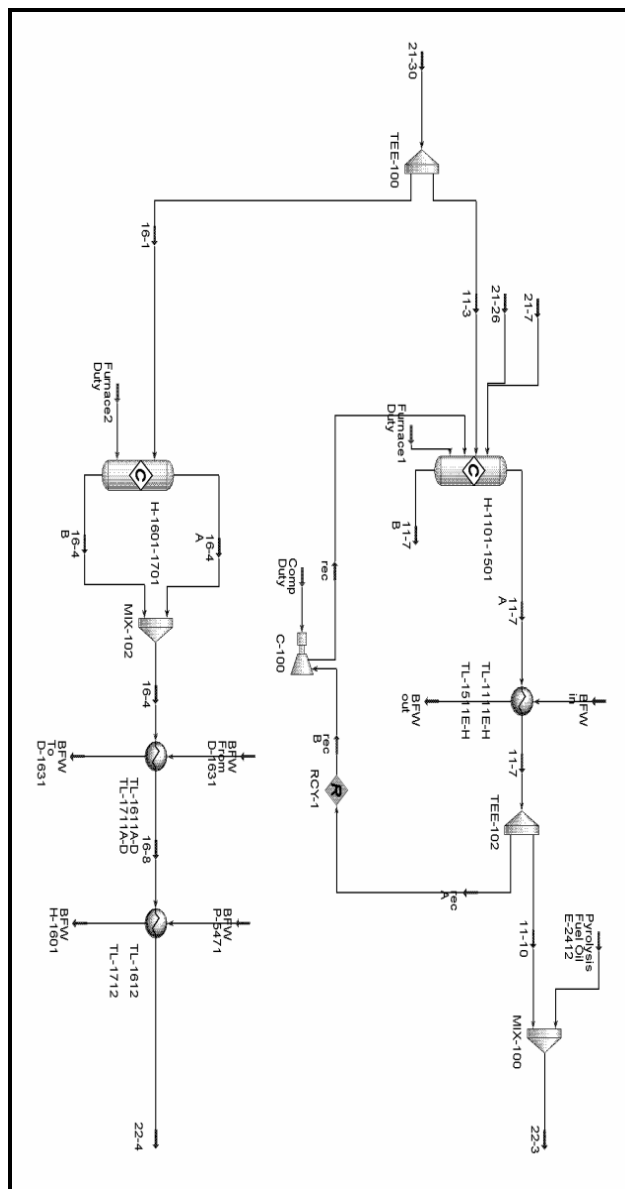
20_2 Comp Fraction		نام جریان	
PFD(Mol)	HYS(Mol)	ترکیبات	
۰	۰	H ₂	هیدروژن
۰	۰	CO	کربن مونوکسید
۰	۰	CO ₂	کربن دی‌اکسید
۰	۰	H ₂ S	هیدروژن سولفات
۰/۰۱	۰/۰۱	CH ₄	متان
۰	۰	C ₂ H ₂	استیلن
۰	۰	C ₂ H ₄	اتیلن
۰/۹۷۵	۰/۹۷۵	C ₂ H ₆	اتان
۰	۰	C ₃ H ₄	پروپان دی‌ان
۰	۰	C ₃ H ₆	پروپن
۰/۰۱	۰/۰۱	C ₃ H ₈	پروپان
۰	۰	C ₄ H ₄	وینیل استیلن
۰	۰	C ₄ H ₆	(۱-۳ بوتادی‌ان)
۰	۰	C ₄ H ₈	(۱- بوتن)
۰	۰	C ₄ H ₁₀	ایزوبوتان
۰	۰	C ₅	ایزوپنتان
۰	۰	C ₆ -C ₈	آرومات‌ها
۰	۰	MEA	مونواتانول آمین
۰/۰۰۶	۰/۰۰۵	H ₂ O	آب
۹۷۱/۶۹	۹۷۱/۱	شدت جریان مولی (KgMole/H)	
۴۴/۹۷	۴۲/۴۷	دما (°C)	
۱۷/۶	۱۷/۶	فشار (BAR)	



شکل ۴- طرح اجمالی شبیه‌سازی واحد شیرین‌سازی

جدول ۱۰- مقایسه نتایج شبیه‌سازی برای واحد کراکینگ

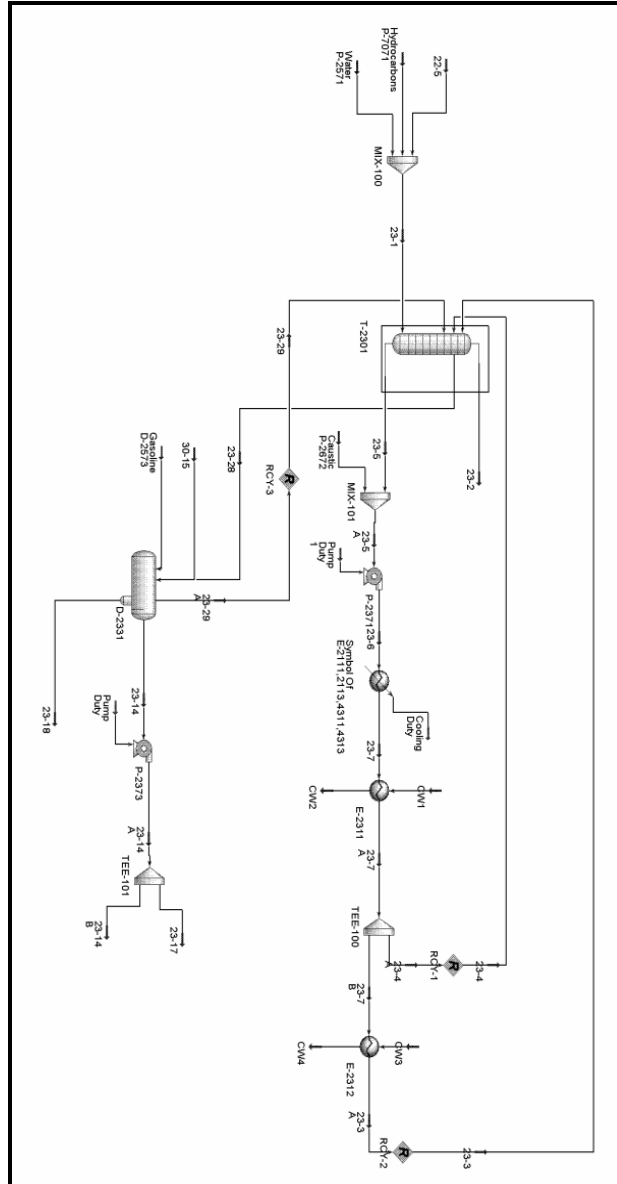
22_3 Comp Fraction		نام جریان	
HYS(Mol)	HYS(Mol)	ترکیبات	
۰/۰۵۵	۰/۰۵۹	H ₂	هیدروژن
۰	۰	CO	کربن مونوکسید
۰	۰	CO ₂	کربن دی‌اکسید
۰	۰	H ₂ S	هیدروژن سولفات
۰/۱۴۹	۰/۱۳۶	C H ₄	متان
۰	۰/۰۰۳	C ₂ H ₂	استیلن
۰/۱۴۰	۰/۱۶۷	C ₂ H ₄	اتیلن
۰/۰۱۴	۰/۰۱۲	C ₂ H ₆	اتان
۰/۰۰۴	۰/۰۰۵	C ₃ H ₄	پروپن دی‌ان
۰/۰۴۵	۰/۰۴۱	C ₃ H ₆	پروپن
۰/۰۰۳	۰/۰۰۶	C ₃ H ₈	پروپان
۰/۰۰۱	۰	C ₄ H ₄	وینیل استیلن
۰/۰۱۱	۰/۰۰۱	C ₄ H ₆	(۱۳-بوتادی‌ان)
۰/۰۰۸	۰/۰۰۸	C ₄ H ₈	(۱- بوتن)
۰/۰۰۳	۰/۰۰۳	C ₄ H ₁₀	ایزوبوتان
۰/۰۰۵	۰/۰۰۵	C ₅	ایزوپنتان
۰/۰۱۴	۰/۰۱۱	C ₆ -C ₈	آرومات‌ها
۰/۱۹۵	۰/۲۴۱	C ₆₊	Hexa CarbonPlus
۰/۳۵۱	۰/۳۰۱	H ₂	آب
۱۱۷۲۰	۱۰۸۲۰	شدت جریان مولی (KgMole/H)	
۲۲۹	۲۲۹	دما (°C)	
۱/۷	۱/۷	فشار (BAR)	



شکل ۵- طرح اجمالی شبیه‌سازی واحد کراکینگ و سرمایه‌ش اولیه

جدول ۱۱- مقایسه نتایج شبیه‌سازی برای واحد شستشوی با آب

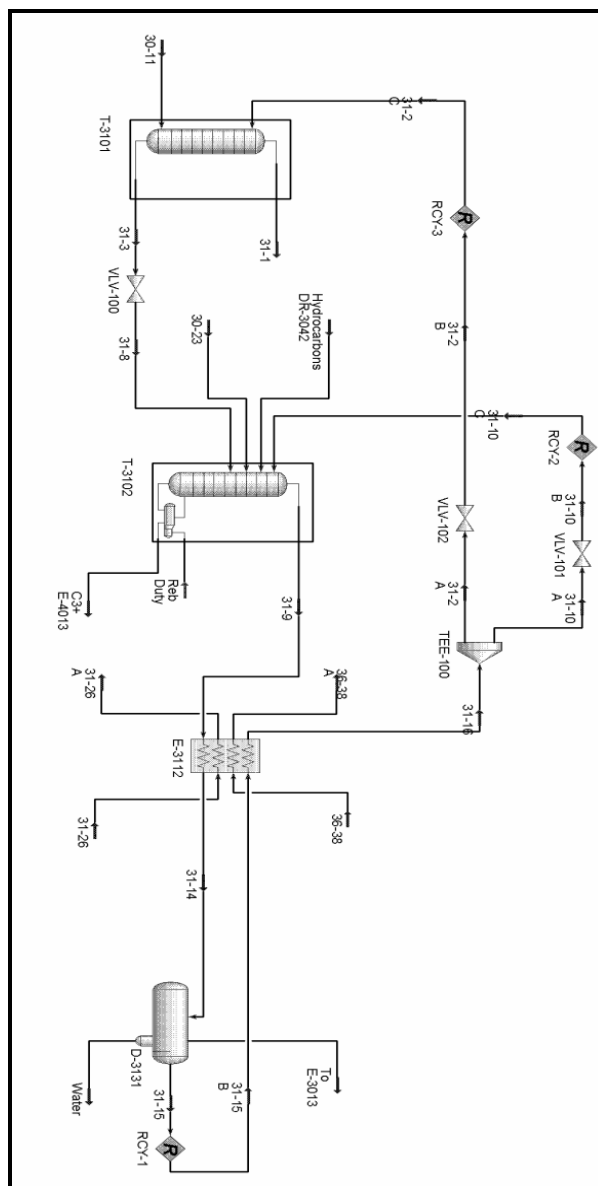
23_2 Comp Fraction		نام جریان	
HYS(Mol)	HYS(Mol)	ترکیبات	
۰/۲۰۸۶	۰/۲۰۸۱	H ₂	هیدروژن
۰/۰۰۰۴	۰/۰۰۰۳	CO	کربن مونوکسید
۰/۰۰۰۱	۰/۰۰۰۱	CO ₂	کربن دی‌اکسید
۰/۰۰۰۱	۰	H ₂ S	هیدروژن سولفات
۰/۲۰۵۱	۰/۲۰۵۴	C H ₄	متان
۰/۰۰۴۸	۰	C ₂ H ₂	استیلن
۰/۲۹۹۸	۰/۳۴۰۶	C ₂ H ₄	اتیلن
۰/۰۹۱۷	۰/۰۹۰۵	C ₂ H ₆	اتان
۰/۰۰۴۵	۰/۰۰۵۱	C ₃ H ₄	پروپان دیان
۰/۰۵۷۷	۰/۰۵۲۸	C ₃ H ₆	پروپن
۰/۰۰۳۶	۰/۰۰۷۵	C ₃ H ₈	پروپان
۰/۰۰۰۷	۰/۰۰۰۴	C ₄ H ₄	وینیل استیلن
۰/۰۱۵۵	۰/۰۱۰۷	C ₄ H ₆	(۱۳-بوتادیان)
۰/۰۱۰۶	۰/۰۰۷۸	C ₄ H ₈	(۱- بوتن)
۰/۰۰۳۶	۰/۰۰۳۴	C ₄ H ₁₀	ایزوبوتان
۰/۰۰۰۲	۰/۰۰۴۳	C ₅	ایزوپنتان
۰/۰۳۸۵	۰/۰۰۴۳	C ₆ -C ₈	آرومات‌ها
۰/۰۰۲۳	۰/۰۰۰۳	C ₆₊	Hexa CarbonPlus
۰/۵۰۸	۰/۰۲۹۱	H ₂	آب
۷۹۶۵	۷۹۲۹	شدت جریان مولی (KgMole/H)	
۴۰	۳۶/۹۲	دما (°C)	
۱/۴۵	۱/۴۵	فشار (BAR)	



شکل ۶- طرح اجمالی شبیه‌سازی واحد شستشوی با آب

جدول ۱۲- مقایسه نتایج شبیه‌سازی برای واحد دی اتانایزر

31_1 Comp Fraction		نام جریان	
HYS (Mol)	HYS (Mol)	ترکیبات	
۰/۲۵	۰/۲۶	H ₂	هیدروژن
۰	۰	CO	کربن مونوکسید
۰	۰	CO ₂	کربن دی‌اکسید
۰	۰	H ₂ S	هیدروژن سولفات
۰/۲۴	۰/۲۶	C H ₄	متان
۰	۰/۰۱	C ₂ H ₂	استیلن
۰/۴	۰/۳۶	C ₂ H ₄	اتیلن
۰/۱۱	۰/۱۱	C ₂ H ₆	اتان
۰	۰	C ₃ H ₄	پروپان دی‌ان
۰	۰	C ₃ H ₆	پروپن
۰	۰	C ₃ H ₈	پروپان
۰	۰	C ₄ H ₄	وینیل استیلن
۰	۰	C ₄ H ₆	(۱۳-بوتادی‌ان)
۰	۰	C ₄ H ₈	(۱- بوتن)
۰	۰	C ₄ H ₁₀	ایزوبوتان
۰	۰	C ₅	ایزوپنتان
۰	۰	C ₆ -C ₈	آرومات‌ها
۰	۰	C ₆₊	Hexa CarbonPlus
۰	۰	H ₂	آب
۶۴۲۰/۴	۶۴۲۰/۲۳	شدت جریان مولی (KgMole/H)	
۳۳/۴۹	-۳۳/۴۹	دما (°C)	
۳۵/۷	۳۵/۷	فشار (BAR)	



شکل ۷- طرح اجمالی شبیه‌سازی واحد دی اتانایزر

۱۲- نتیجه گیری

در این مقاله تأثیر نوع خوراک و نوع فرایند مورد استفاده بر ترکیب درصد خروجی واحد اولفین به تفصیل بررسی شده است که نتایج آن به شرح زیر می باشد.

۱- با مشاهده کیفیت محصولات پتروشیمی های بر پایه اتان و نیز به دلیل بهینه بودن هزینه های سرمایه گذاری و عملیاتی این خوراک برای تولید اولفین، استفاده از خوراک های گازی، مقرون به صرفه می باشد.

۲- حال که خوراک گازی به دلیل کم هزینه بودن فرایندهای کراکینگ به سرعت جایگزین خوراک مایع شده است، نیاز مبرم برای به روز رسانی پتروشیمی های با خوراک مایع و تأکید بر احداث مجتمع های با خوراک اتان احساس می شود.

۳- امروزه تحقیقات در مورد استفاده از خوراک های جدید مانند نفت خام و متانول برای کراکینگ اولفین بسیار گسترده شده است. می توان با دریافت این فناوری های جدید گام مؤثری در راستای بهبود کیفیت و قیمت تمام شده محصولات برداشت [۹].

با وجود مطابقت حداکثری نتایج خروجی شبیه سازی، ذکر چند نکته برای رفع ایرادات شبیه سازی و شناخت نقاط ضعف شبیه سازی لازم به نظر می رسد که در زیر آمده است:

۱- در شبیه سازی تخصصی مبدل ها و ادوات حرارتی، استفاده از این نرم افزار توصیه نمی شود. ارائه نشدن نمودار دما و نبود تأثیر مشخصات این دستگاه ها مانند جنس فلزات بدنه بر خروجی نتایج از یک سو و کامل نبودن لیست ادوات حرارتی مانند مبدل پره ای از سوی دیگر از کاربردی بودن این ادوات کاسته است.

۲- اطلاع دقیق از معادلات سینتیکی و استفاده از راکتورهای لوله ای^۱ دستیابی به نتایج دقیق تر را امکان پذیر کرده و مدل سازی ریاضی و وجود اطلاعات دقیق پارامتری از اندازه کوره، دمای شعله و فهرست دقیق واکنش های انجام شده، نتایج قابل تاملی در پی خواهد داشت [۱۰ و ۱۱].

مراجع

- [۱] سامانی، خ. اتیلن و مشتقات آن. وزارت صنایع، معاونت امور صنایع، دفتر صنایع غیر فلزی، (۱۳۸۷).
- [2] Petrochemical Processes Handbook, Gulf Publishing Company, (2005).
- [3] www.Linde .com
- [۴] چاول، آلین و لغبور، گیلس. ترجمه محمد حقیقی. فرایندهای پتروشیمی، مشخصات فنی و اقتصادی. انتشارات دانشگاه سهند، جلد اول، (۱۳۸۲).
- [5] Z.Belohlav, P.Zamostny, T.Herink. "The Kinetic Model of Thermal Cracking for Olefins production". Chemical Engineering and Processing; 42(6):461-473, (2002).
- [6] T.Gal. "Mathematical Modeling Computer Simulation of Thermal Cracking Furnace". University Docent, Institute of Chemical Engineering; (2007).
- [7] C.XinDe, Y.YongJie. "Study on the technology of thermal cracking of paraffin to alpha olefins". Analytical and Applied Pyrolysis; 81:106-112, (2008).
- [8] Y. H.Guo, M.Pu, J. Y. Wu, J. Y. Zhang, B. H. Chen. "Theoretical study of the cracking mechanisms of linear α -olefins catalyzed by zeolites". Applied Surface Science; 254(2):604-60, (2007).
- [9] T. Ren, M.K. Patel, K. Blok. "Steam cracking and methane to olefins: Energy use, CO2 emissions and production costs". Energy; 33(5):817-83, (2008).
- [10] G.F. Froment. "Kinetics and reactor design in the thermal cracking for olefins production". Chemical Engineering Science; 47(9-11):2163-2177, (1992).
- [11] M. W.Goethem, S. Barendregt, J. Grievink, J. A. Moulijn, P. J.T. Verheijen. "Model-based, thermo-physical optimisation for high olefin yield in steam cracking reactors". Chemical Engineering Research and Design; 88(10):1305-1319, (2010).