مدلسازی و شبیه سازی فرایند تولید متان در راکتورهای حلقوی و لوله ای و مقایسه عملکرد آنها

فاطمه آزادی منفرد[1]، الهام یساری[2,*]،
دانشگاه فردوسی مشهد
1- ارائه دهنده: S.Azadi320@gmail.com
*2- مسئول مکاتبات: *elhamyasari@ferdowsi.um.ac.ir*

چکیده

در این مطالعه نتایج حاصل از شبیه سازی فرایند تولید متان در دو راکتور حلقوی و لوله ای مورد مطالعه قرار گرفته است. جهت شبیه سازی فرایند روابط انتقال جرم و انرژی بصورت عددی حل شده اند. فرایند پایا و یک بعدی در نظر گرفته شده است. از مدل شبه همگن برای معادلات انتقال جرم و انرژی استفاده شده است. نتایج شبیه‌سازی نشان داد که در هر دو راکتور با افزایش دمای ورودی میزان تبدیل افزایش می یابد. همچنین در یک دمای مشخص از سیال ورودی میزان تبدیل راکتور حلقوی از راکتور لوله‌ای بیشتر است. علاوه بر این نتایج نشان داد برای یک دمای مشخص از سیال ورودی دمای ماکزیمم در راکتور لوله‌ای بیشتر از راکتور حلقوی است. همچنین نتایج نشان داد که با افزایش دمای خنک کننده در هر دو راکتور، هم دمای ماکزیمم و هم میزان تبدیل افزایش می یابد.

واژه‌های کلیدی: تولید متان، شبیه سازی عددی، راکتور حلقوی، راکتور لوله ای

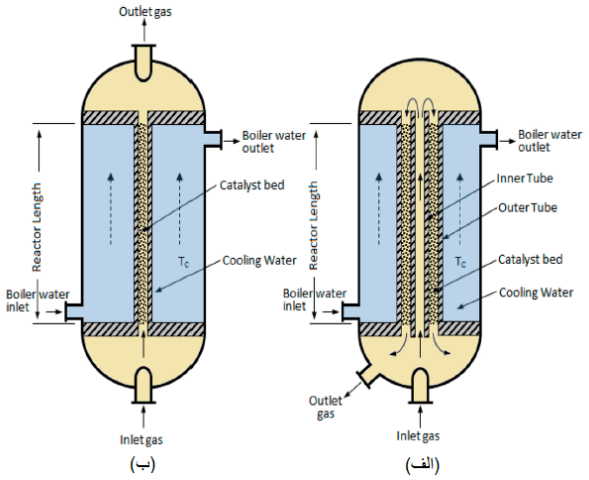
1- مقدمه

امروزه تولید متان از اکسیدهای کربن جهت تبدیل توان به گاز برای ذخیره سازی انرژی، مورد توجه قرار گرفته است [1-4]. در این فرایند برق اضافی برای تولید هیدروژن توسط الکترولیز آب استفاده می شود. سپس،

1-دانشجو کارشناسی ارشد مهندسی شیمی گرایش مدلسازی شبیه سازی وکنترل دانشگاه فردوسی مشهد

2- استادیارگروه مهندسی شیمی دانشگاه فردوسی مشهد

هیدروژن با افزودن اکسیدهای کربن به متان تبدیل می شود. مخلوط گاز محصول خشک شامل متان، هیدروژن تبدیل نشده و اکسیدهای کربن است و به آن گاز طبیعی مصنوعی (SNG) می گویند، که در صورت تأمین الزامات مربوط به کیفیت گاز، به راحتی می تواند توسط زیرساخت های موجود ذخیره و توزیع شود. در فرایند متانیشن طراحی یک راکتور کارآمد برای عملکرد پویا به دلیل گرمازایی شدید واکنش و همچنین تأثیرات دینامیکی احتمالی تغییر بار، کار دشواری است. در این زمینه ، انتخاب یک مدل راکتور مناسب یک گام اولیه است که به طور قاطع کاربرد و قابلیت اطمینان طراحی حاصل را تعیین می کند. انواع مختلف راکتور برای فرآیند تولید متان می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد. در این مطالعه از راکتور حلقوی، که اساساً یک مبدل حرارتی لوله ای ساده است و در آن کاتالیزور در قسمت حلقوی، بین لوله های داخلی و خارجی پر می‌شود ، استفاده شده است تا عملکرد مبدل را بهبود بخشد [5]. در این مطالعه فرایند تولید متان در راکتور حلقوی بصورت عددی مدلسازی سازی شده است و نتایج آن با داده های راکتور معمولی لوله ای مقایسه شده است.



شکل 1- نمای شماتیک (الف) راکتور حلقوی و (ب) راکتور لوله ای [5]

2- مدلسازی فرایند

در این تحقیق مدلسازی فرایند تولید متان در دو راکتور حلقوی و لوله ای مورد مطالعه قرار گرفته است (شکل 1). راکتور حلقوی (شکل 1-الف) یک مبدل عمودی ساده از نوع دو لوله است که کاتالیزور در فضای حلقوی بسته بندی شده و آب دیگ بخار در قسمت پوسته گردش می کند .گاز خوراک ابتدا از پایین به سمت بالا به داخل لوله داخلی جریان می یابد و توسط گرمای تولید شده در بستر کاتالیزور گرم می شود. سپس در بالای راکتور جمع شده و به بستر کاتالیزور می ریزد. بستر کاتالیزور با آب جوش در گردش در قسمت پوسته و گاز خوراکی که از قبل در لوله داخلی گرم می شود ، خنک می‌شود. جهت مدلسازی فرایند از مدل شبه همگن

استفاده شده است. نتایج مدلسازی راکتور لوله ای با کار فیشر و همکاران [6]مورد ارزیابی قرار گرفت و نتایج مدلسازی با 1 درصد خطا، با نتایج کار فیشر وهمکاران مطابقت دارد .

مدل شبه همگن: در این مدل ویژگی های فاز کاتالیست وگازی به عنوان یک فاز شبه همگن بیان می شود و از مقاومت انتقال حرارت وجرم بین فازها و درون ذرات کاتالیست صرف نظر می شود. بنابراین پیچیدگی مدل در مقایسه با مدل های ناهمگن کمتر است.

فرضیات مدلسازی: فرایند پایا و یک بعدی است و از اثرات شعاعی صرف نظر شده است.

معادلات انتقال جرم وانرژی در طول راکتور بصورت زیر محاسبه می شود [5, 6]:

$$-v_z\frac{\partial w_\alpha}{\partial z}+\frac{M_\alpha(1-\varepsilon_{bed})\rho_{cat}}{\bar{\rho}}\sum_{i=1}^{n_R}v_{\alpha i}r_i=0 \qquad (1)$$

$$-v_z\bar{\rho}_1\bar{c}_{p_1}\frac{\partial T_1}{\partial z}-4\frac{Kw_1}{D_1}(T_2-T_1)=0 \qquad (2)$$

$$-v_z\bar{\rho}\bar{c}_p\frac{\partial T_1}{\partial z}+(1-\varepsilon_{bed})\rho_{cat}\sum_{i=1}^{n_R}\Delta H_{Ri}r_i-4Kw_1\frac{D_1}{{D_2}^2-{D_1}^2}(T_2-T_1)$$
$$-4Kw_2\frac{D_2}{{D_2}^2-{D_1}^2}(T_2-T_C)=0 \qquad (3)$$

$$w_\alpha\,|_{z=0}=w_{\alpha in}\quad T_1\,|_{z=0}=T_{10}\quad T_2\,|_{z=0}=T_{20} \qquad (4)$$

در روابط بالا v_z سرعت جریان گاز ، w_α جز جرمی ترکیب α، M_α جرم مولی ترکیب α، ε_{bed} تخلخل بستر، ρ_{cat} چگالی کاتالیست، $\bar{\rho}$ چگالی متوسط، $v_{\alpha i}$ ضریب استوکیومتری ترکیب α در واکنش i، r_i نرخ واکنش i ، n_R تعداد واکنش ها، $\bar{c}_p$ ظرفیت گرمایی ویژه متوسط، ΔH_{Ri} گرمای واکنش i، Kw_1 ضریب انتقال حرارت کلی بین لوله 1 و 2، T_2 دمای داخل پوسته، Kw_2 ضریب انتقال حرارت کلی بین لوله 2 وپوسته، $w_{\alpha in}$ جز جرمی ورودی ترکیب α، T_{10} دمای ورودی واکنش دهنده‌ها به لوله 1، T_{20} دمای ورودی واکنش دهنده‌ها به لوله 2 می باشد.

پروفایل سرعت پلاگ براساس موازنه جرم کلی از رابطه زیر حاصل می شود:

$$v_z(z)=\left[\bar{\rho}_{in}^G/\bar{\rho}^G(z)\right]v_{zin} \qquad (5)$$

در این رابطه G بیانگر فاز گاز است.

سیال خنک کننده برای خارج کردن حرارت اهمیت دارد اما در این مقاله باجزییات کمی بیان شده است.

جهت محاسبه افت فشار از معادله ارگان استفاده شده است.

سینتیک فرایند: فرایند متانیشن یک واکنش تعادلی گرمازا همراه با کاهش حجم است. واکنش می تواند بطور مستقیم با متانیشن کربن دی اکسید در یک مرحله بیان شود:

$$CO_2+4H_2\leftrightarrow CH_4+2H_2O \qquad \Delta H_R^0=-165\ \text{kJ/mol} \qquad (6)$$

مطالعات زیادی تاکنون پیرامون سینتبک واکنش ها صورت گرفته و مدل های سینتیکی مختلفی ارائه شده است [7, 8]. در تحقیق حاضر از مدل سینتیکی کوشانی و همکاران [9]،که در جدیدترین تحقیقات مورد استفاده قرار می گیرد، استفاده شده است. کاتالیزور مورد بررسی(کوشانیNi/Al) اکتیویته بالایی را در دماهای نسبتاً معمول نشان می دهد، به طوریکه که تشکیل مونوکسید کربن از طریق واکنش تغییر آب و گاز ناچیز است.

پارامترهای طراحی راکتور و شرایط عملیاتی به ترتیب در جدول های 2 و 3 ارائه شده است:

جدول2- پارامترهای طراحی راکتور

راکتور لوله ای	راکتورحلقوی	کاتالیست
L=3.43 m D= 0.01m $n_{tot,in}$ =3.85e-2 mol/s	L=3.43 m D_{in}=0.0022 m D_{out}= 0.00975 m $n_{tot,in}$ =3.85e-2 mol/s	D= 0.002 m c_p=1100 J/kgK ρ_{cat}=2300kg/m^3 ε_{bed}=0.4

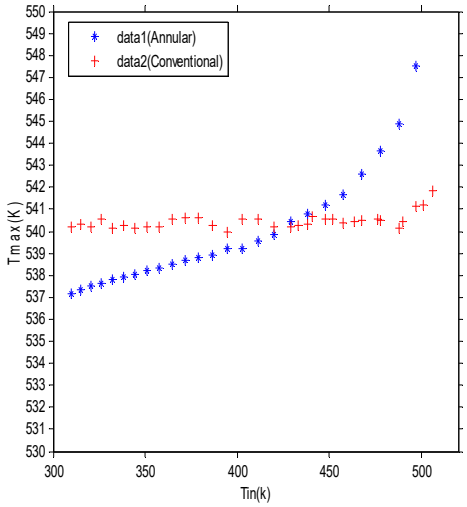
جدول3-شرایط عملیاتی واکنش

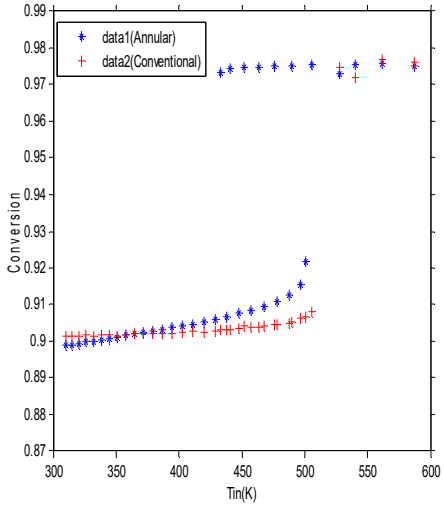
دبی مولی خوراک	نسبت مولی H_2/CO_2 در خوراک	دمای ورودی سیال خنک کننده	فشار	دمای ورودی خوراک
$3/85*10^3$ mol/s	4/1	494/2 K	15 bar	514/5 K

معادلات انتقال جرم و انرژی وروابط وابسته بصورت عددی گسسته شده ومدلسازی با استفاده از نرم افزار متلب صورت گرفته است.

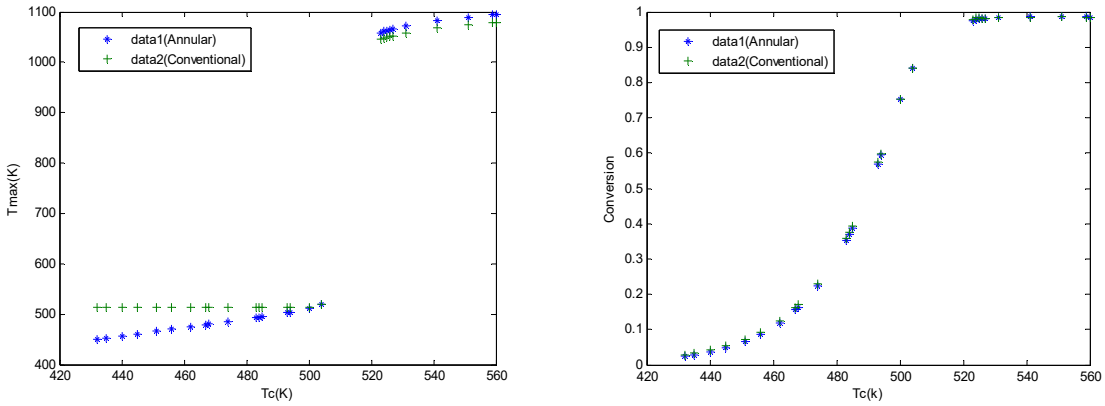
3-مقایسه نتایج راکتور های لوله ای بستر ثابت و راکتور حلقوی

در این بخش به مقایسه نتایج حاصل از شبیه سازی دو راکتور حلقوی و لوله ای پرداخته شده است.





(الف) (ب)



(ج)

(د)

شکل 2- نتایج شبیه سازی در دو راکتور حلقوی و لوله ای: (الف) نمودار تغییرات میزان تبدیل برحسب دمای ورودی، (ب) نمودار تغییرات دمای ماکزیمم برحسب دمای ورودی،(ج) نمودار تغییرات میزان تبدیل برحسب دمای خنک کننده، (د) نمودار تغییرات دمای ماکزیمم برحسب دمای خنک کننده.

در شکل2 نتایج مدلسازی در دو راکتور حلقوی و لوله ای نشان داده شده است. عملکرد دو راکتورحلقوی و لوله ای با مقایسه میزان تبدیل و دمای حداکثر ایجاد شده در طول راکتور مورد بررسی قرار می‌گیرد. همان طور که در شکل 2 (الف) مشاهده می شود در هردو راکتور با افزایش دمای ورودی میزان تبدیل افزایش یافته است که این امر به این دلیل است که با افزایش دمای ورودی گرمای واکنش زیاد می‌شود و سرعت واکنش مربوطه افزایش می یابد، در نتیجه میزان تبدیل افزایش می بابد [10]. همان طور که در شکل 2 (الف) مشاهده می‌شود در بازه 400-550کلوین که بازه مناسب برای جلوگیری از تخریب کاتالیست می‌باشد، میزان تبدیل راکتور حلقوی در یک دمای مشخص مانند505/8 کلوین،7/41 درصد از راکتور لوله ای بیشتر است. از طرف دیگر برای رسیدن به یک میزان تبدیل خاص، دمای ورودی راکتور لوله ای بیشتر است بنابراین نیازمند صرف انرژی برای گرم کردن خوراک قبل از راکتور خواهیم بود. این درحالی است که در راکتور حلقوی با توجه به دمای ورودی مورد نیاز کمتر، میزان انرژی لازم برای پیشگرم شدن کمترخواهد بود. همان طور که در شکل 2 (ب) مشاهده می‌شود با افزایش دمای ورودی، دمای ماکزیمم به دلیل افزایش سرعت واکنش و انتقال حرارت ضعیف افزایش می‌یابد. نتایج نشان می‌دهد که در دماهای ورودی مختلف(قبل از رفتار فرار دما) دمای ماکزیمم در راکتور لوله‌ای بیشتر است .

شکل 2 (ج و د) به ترتیب تاثیر دمای خنک کننده بر میزان تبدیل و دمای ماکزیمم را نشان می‌دهد. همان طور که نتایج شکل 2 (ج) نشان می‌دهد،با افزایش دمای خنک کننده، میزان تبدیل دوراکتور تقریبا باهم برابر است. تبدیل بالا در بازه 0/75 تا 0/9 در بازه دمایی 500K تا 520 K رخ داده است.

همان طور که در شکل 2 (د) مشاهده می شود، با افزایش دمای خنک کننده، افزایش دمای ماکزیمم در راکتور لوله ای بیشتر است. با افزایش دمای خنک کننده از 520 K شاهد ایجاد دمای ماکزیمم 1000 K در هر دو راکتور می باشیم که این رفتار در کارهای مشابه صورت گرفته نیز دیده شده است [11].

4- نتیجه گیری

با بررسی نتایج شبیه سازی ملاحظه گردید افزایش دمای ورودی، افزایش میزان تبدیل را درهردو راکتور به دنبال دارد. علاوه براین، میزان تبدیل راکتور حلقوی در یک دمای مشخص سیال ورودی از راکتور لوله ای بیشتر است. ضمنا نتایج بیانگر این است که برای یک دمای مشخص سیال ورودی، دمای ماکزیمم در راکتور لوله ای بیشتر از راکتور حلقوی است. همچنین نتایج نشان داد که با افزایش دمای خنک کننده با وجود تقریبا برابر بودن میزان تبدیل،دمای ماکزیمم راکتور لوله ای بیشتر است.

مراجع

[1] Rönsch, S., S.; Schneider, J.; Matthischke, S.; Schlüter, M.; Götz, M.; Lefebvre, J.; Prabhakaran, P.; Bajohr, S., Review on methanation–From fundamentals to current projects. Fuel, 2016. **166**: p. 276-296.
[2] Kreitz, B., G.D. Wehinger, and T. Turek, Dynamic simulation of the CO2 methanationin a micro-structured fixed-bed reactor. Chemical Engineering Science, 2019. **195**: p. 541-552.
[3] Matthischke, S., Krüger, R.; Rönsch, S.; Güttel, R., Unsteady-state methanation of carbon dioxide in a fixed-bed recycle reactor—Experimental results for transient flow rate ramps. Fuel Processing Technology, 2016. **153**: p. 87-93.
[4] Try, R ,. Bengaouer, A.; Baurens, P.; Jallut, C., Dynamic modeling and simulations of the behavior of a fixed-bed reactor-exchanger used for CO2 methanation. AIChE journal, 2018. **64**(2): p. 468-480.
[5] Alarifi, A., A. Elkamel, and E. Croiset, Steady-state simulation of a novel annular multitubular reactor for enhanced methanol production. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2013. **52**(44): p. 15387-15393.
[6] Fischer, K.L., M.R. Langer, and H.r. Freund, Dynamic carbon dioxide methanation in a wall-cooled fixed bed reactor: comparative evaluation of reactor models. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2019. **58**(42): p. 19406-19420.
[7] Xu, J. and G.F. Froment, Methane steam reforming, methanation and water-gas shift: I. Intrinsic kinetics. AIChE journal, 1989. **35**(1): p. 88-96.
[8] Kopyscinski, J., Production of synthetic natural gas in a fluidized bed reactor. Disseration ETH Zurich, 2010.
[9] Koschany, F., D. Schlereth, and O. Hinrichsen, On the kinetics of the methanation of carbon dioxide on coprecipitated NiAl (O) x. Applied Catalysis B: Environmental, 2016. **181**: p. 504-516.
[10] Kreitz, B., Wehinger, G. D. and Turek, T., Dynamic simulation of the CO2 methanation in a micro-structured fixed-bed reactor, Chemical Engineering Science, 2018.

[11] Ducamp, J., Bengaouer, A. and Baurens, P,. Modelling and Experimental Validation of a CO2 Methanation Annular Cooled Fixed-Bed Reactor Exchanger, the canadian journal of chemical engineering, 2016.

تمایل دارم این مقاله را در بخش ■ پوستر ☐ شفاهی ارائه نمایم

Modeling and Simulation of Methane Production Process in Annular and Tubular Reactors and Comparing Their Prformance

Fatemeh Azadi Monfared
Elham Yasari*
Presenter: S.Azadi320@gmail.com
*Corresponding Author:*elhamyasari@ferdowsi.um.ac.ir*

Abstract

In this study, the results of simulation of methanation process in the annlar and tubular reactors have been studied. To simulate the process, the mass and energy conservation equations are solved numerically. The process is considered to be steady state and one-dimensional. A quasi-homogeneous model is used for the mass and energy conservation equations. The simulation result showed that in both reactors, the conversion rate increases with increasing inlet temperature, and also at a certain inlet fluid temperature, the conversion rate of the annular reactor is higher than that of the tubular reactor. In addition, the results showed that for a given temperature of the inlet fluid, the maximum temperature in the tubular reactor is higher than in the annular one. The results also showed that by increasing coolant temperature in both reactors, the maximum temperature and the conversion rate increase.

Keywords: Methane Production, Numerical Simulation, Annular Reactor, Tubular Reactor