



مدل سازی و شبیه سازی عددی راکتورهای تبدیل کاتالیستی پالایشگاه تهران

رضا خاوری کهنه شهری^۱، محمود سلیمی^۲، ماشاالله رضا کاظمی^۳، سعید شیرازیان^{۴*}

گروه مهندسی شیمی، دانشکده فنی-مهندسی، دانشگاه آزاد اسلامی واحد اراک

*Corresponding Author E-mail: shirazian@iust.ac.ir

چکیده

در این مقاله، یک مدل سینتیکی، برای مدل سازی فرآیند تبدیل کاتالیستی ارائه شده است. خوراک واحدهای تبدیل کاتالیستی، نفتای سنگین شامل پارافین‌ها، نفتن‌ها و آروماتیک‌های با تعداد کربن ۶ الی ۹ می‌باشد. در این راکتورها چند واکنش اصلی به صورت هم‌زمان رخ می‌دهند که شامل واکنش‌های دی‌هیدروژناسیون، دی‌هیدروسیکلیزاسیون، ایزومریزاسیون، هیدروکراکینگ و واکنش بسط حلقه می‌باشند. با تعیین شرایط مرزی، المانی استوانه‌ای از کاتالیست در داخل راکتور در نظر گرفته و معادلات جرم و انرژی بر روی آن المان در مختصات استوانه‌ای نوشته شده و معادلات دیفرانسیل حاکم استخراج شده است. سپس بر اساس این معادلات با نرم افزار مطلب به شبیه سازی واحد تبدیل کاتالیستی پالایشگاه تهران پرداخته و تغییرات غلظت، دما و عدد اکتان و ... بدست آمده است. مقایسه نتایج حاصل از شبیه سازی و مقادیر واقعی، دقت بالای این مدل را تایید می‌کند.

واژه‌های کلیدی: مدل سینتیکی، فرآیند تبدیل کاتالیستی، مدل سازی، شبیه سازی عددی.

۱- مقدمه

۱- کارشناس مهندسی شیمی.

۲- عضو هیئت علمی گروه مهندسی شیمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد اراک.

۳- کارشناس ارشد مهندسی شیمی.

۴- دانشجوی دکتری مهندسی شیمی.



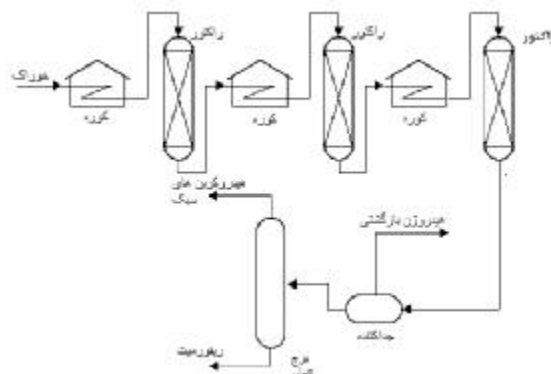
واحد تبدیل کاتالیستی یکی از واحدهای اصلی هر پالایشگاه است که هدف اصلی آن افزایش عدد اکتان بنزین می باشد. اولین واحد تبدیل کاتالیستی در سال 1939 در آمریکا به منظور تولید بنزین با عدد اکتان بالا و همچنین مواد شیمیایی آروماتیکی راه اندازی شد. کاتالیست مورد استفاده در این فرآیند از نوع مولیبدن بر پایه آلومینا و راکتور آن از نوع بستر ثابت می باشد. سرعت بالای کک گرفتگی و نیاز به احیاء کردن در فواصل زمانی کوتاه، باعث شد که کاتالیست های جدیدی چون پلاتین بر روی پایه آلومینا و پلاتین - رنیم بر روی پایه آلومینا بکار گرفته شود [1].

بنزینی که از تقطیر مستقیم نفت خام بدست می آید دارای عدد اکتان پایینی است، بنابراین لازم است تا واحدهای مختلف پالایش، بدون استفاده از مواد افزودنی، بنزین نامرغوب را به بنزین مرغوب تبدیل کند، این عمل در واحد تبدیل کاتالیستی انجام می شود.

در مورد هیدروکربن های پارافینی، هر چه تعداد شاخه ها افزایش یابد عدد اکتان بالا می رود و همچنین حلقوی شدن سبب افزایش عدد اکتان می شود. با توجه به موارد مذکور واضح است که تبدیل هیدروکربن های پارافینی به ایزو پارافین ها و نفتن ها به آروماتیک ها منجر به افزایش عدد اکتان می شود. تولید آروماتیک ها و هیدروژن برای صنایع مختلف شیمیایی از اهداف دیگر این واحد می باشد [2]. در شکل (1) یک فرآیند تبدیل کاتالیستی شبه احیا کننده¹ نشان داده شده است. خوراک مورد نیاز این فرآیند، مخلوط بنزین و نفتای سنگین است که دارای عدد اکتان پایین است و درصد آروماتیک ها در آن کم بوده و دارای نقطه جوشی در حدود 197-47 درجه سانتیگراد است که با توجه به شرایط پالایشگاه تغییر می کند. خوراک فرآیند تبدیل کاتالیستی از هیدروکربن های مختلف پارافینی، نفتنی، آروماتیک ها و بندرت الفینی شامل پنج الی ده اتم کربن تشکیل شده است [3].

معمولاً بهترین دسته بندی برای خوراک فرآیند تبدیل کاتالیستی نرمال پارافین ها، ایزوپارافین ها، الکیل سیکلوپنتان ها، الکیل سیکلوهگزان ها، بنزن، آلکیل بنزن می باشند. از محصولات جانبی واحد کاتالیستی، هیدروژن و گازهای سبک نظیر پروپان و بوتان می باشد که مقداری از هیدروژن تولیدی در خود واحد مصرف شده و بقیه به واحدهای دیگر فرستاده می شود [4].

¹ Semi regenerative



شکل 1. شمای فرآیند تبدیل کاتالیستی از نوع شبه احیا کننده¹ [3].

در ابتدا، خوراک با هیدروژن برگشتی مخلوط شده، پیش گرم شده، و پس از عبور از یک مبدل حرارتی در دمای واکنش که 980 - 900 درجه سانتیگراد، وارد راکتور اول می‌شود. مواد خروجی از راکتور پس از عبور از مبدل حرارتی دوم در دمای واکنش وارد راکتور دوم می‌شوند، این عمل برای راکتور سوم نیز تکرار می‌شود. این راکتورها به صورت راکتورهای بستر ثابت بوده و جریان گاز به صورت شعاعی در آن‌ها جریان دارد. مواد خروجی از راکتور سوم خنک شده و وارد فلش درام می‌شوند. محصول نهایی از انتهای مخزن گرفته شده و گازهای سبک همراه هیدروژن از بالا جدا می‌شوند. در این فرآیند فشار کلی راکتورهای واحد حدود سی بار و نسبت مولی جریان برگشتی به خوراک بین سه تا نه می‌باشد.

واحدهای بستر ثابت رفرمینگ عموماً شامل سه یا چهار راکتور آدیاباتیک می‌باشند این راکتورها در محدوده دمایی 480-540 درجه سانتیگراد عمل می‌کنند. تغییرات دما در راکتورها وابسته به واکنش‌های انجام شده در آن‌ها می‌باشد در حالت کلی افزایش دما باعث افزایش سرعت واکنش‌ها، افزایش عدد اکتان، کاهش بازده کل و افزایش مواد سبک (متان تا بوتان) و نیز تشکیل کک می‌شود. آسان‌ترین راه افزایش عدد اکتان افزایش دما است لذا تمایل به کارکرد در دماهای بالاتر وجود دارد. برای این منظور از کاتالیزورهای پایدارتر و گزینش‌پذیرتر استفاده می‌شود که نتیجه‌ی آن تولید بیشتر آروماتیک می‌باشد، بدون آن که بازده افت چندانی داشته باشد [3].

عمده واکنش‌های انجام شده در راکتور اول، از نوع واکنش‌های دی هیدروژناسیون می‌باشند. در این واکنش‌ها سیکلوآلکان‌ها به آروماتیک‌ها تبدیل می‌شوند، این واکنش‌ها دارای سرعت بالایی بوده و باعث افت سریع دما می‌شوند، همچنین این واکنش‌ها به علت گرماگیر بودن، در دمای بالا پیشرفت خوبی از خود نشان می‌-

¹ Semi regenerative



دهند. علاوه بر واکنش‌های دی هیدروژناسیون واکنش‌های دیگری نیز همزمان رخ می‌دهند ولی تأثیرگذاری آن‌ها با توجه به شرایط حاکم بر راکتور کمتر می‌باشد [5].

خوراک ورودی راکتور دوم، محصول راکتور اول می‌باشد. در این راکتور به علت کم بودن غلظت نفتن‌ها از واکنش‌های دی هیدروژناسیون کاسته شده و واکنش‌های دیگری به نام واکنش‌های ایزومری و هیدروکراکینگ از خود فعالیت نشان می‌دهند. بدین خاطر افت دما در این راکتور نسبت به راکتور اول کم می‌باشد.

سومین راکتور واحد تبدیل کاتالیستی از نظر اندازه بزرگ‌ترین راکتور واحد می‌باشد. در این راکتور واکنش‌های دی هیدروسیکلیزاسیون و هیدروکراکینگ سرعت بالایی دارند و به خاطر گرماده بودن این واکنش‌ها، دمای راکتور بالا بوده و مقدار زیادی کاتالیست بکار می‌رود. واکنش‌های دی هیدروآلکیلاسیون از نوع کندترین واکنش‌هاست که با افزایش عدد کربن و دما و فشار فعال تر می‌شوند [1].

2- مدل‌سازی راکتورهای تبدیل کاتالیستی

طراحی راکتور برای یک واکنش، نیازمند یک مدل سینتیکی مناسب جهت انجام واکنش می‌باشد. مدل‌سازی در حقیقت عبارت است از استخراج معادلات ریاضی که با حل آن‌ها بتوان چگونگی تغییرات پارامترهای اصلی فرآیند از قبیل دما، فشار و غلظت واکنش دهنده‌ها را در داخل راکتور تخمین زد. معادلات ریاضی بر اساس رابطه اصلی موازنه به صورت زیر نوشته می‌شوند:

$$(1) \quad \text{تجمع} + \text{مصرف} + \text{خروجی} \text{ها} = \text{تولید} + \text{ورودی‌ها}$$

بمنظور مدل‌سازی، المانی به شکل استوانه ای برای هر یک از اجزاء در نظر گرفته می‌شود. موازنه جرم و انرژی با فرض این که دما در جهت محوری راکتور یکنواخت می‌باشد ($dT_z=0$) و غلظت در جهت محوری راکتور یکنواخت می‌باشد ($dN_z=0$)، برای هر یک از اجزاء نوشته می‌شود. بر اساس معادلات بقاء و با مشخص بودن اجزاء خوراک، واکنش‌ها، سینتیک واکنش‌ها و پارامترهای ترمودینامیکی تغییرات غلظت و دما و ... در داخل راکتورها بدست می‌آید. فرض می‌شود که واکنش‌ها در فاز گاز صورت می‌گیرند.

2-1- واکنش‌های اصلی فرآیند تبدیل کاتالیستی

در فرآیند تبدیل کاتالیستی به علت گستردگی اجزاء واکنش دهنده، واکنش‌های متعددی رخ می‌دهند اصلی‌ترین این واکنش‌ها که در این مدل در نظر گرفته شده‌اند به صورت زیر می‌باشد [6]. یک سری از واکنش‌ها مطلوب می‌باشند و باعث افزایش عدد اکتان می‌شوند و یک سری از آن‌ها نامطلوب بوده و باعث کاهش عدد اکتان می‌شوند، ولی در کل واکنش‌های غالب واکنش‌های مطلوب می‌باشند. فرم کلی واکنش‌های ذکر شده و معادلات سرعت مربوطه به صورت زیر می‌باشند [6].



Naphthene f Aromatics+3H ₂	$-(\frac{dN_N}{dV_R})_1 = k_{1n} (P_N - P_A P_{H_2^3} / K_{1n}), n=6-9$	Dehydrogenation
Naphthene (ACP _n) f Naphthene (ACH _n)	$-(\frac{dN_N}{dV_R})_2 = k_{2n} (P_{ACP_n} - P_{ACH_n} / K_{2n}), n=6-9$	Ring Expansion
Naphthene +H ₂ f Paraffins	$-(\frac{dN_N}{dV_R})_3 = k_{3n} (P_N P_{H_2} - P_P / K_{3n}), n=6-9$	Dyhydrocyclization
NP _n f IP _n	$-(\frac{dN_P}{dV_R})_4 = k_{4n} (P_{NP_n} - P_{IP_n} / K_{4n}), n=6-9$	Isomerization
C _n H _{2n+2} + $\frac{n-3}{3}$ H ₂ → $\frac{n}{15}$ (C ₁ +C ₂ +C ₃ +C ₄ +C ₅)	$-(\frac{dN_P}{dV_R})_5 = k_{5n} (P_P / P_I), n=6-9$	Hydrocracking of paraffins
C _n H _{2n} + $\frac{n-3}{3}$ H ₂ → $\frac{n}{15}$ (C ₁ +C ₂ +C ₃ +C ₄ +C ₅)	$-(\frac{dN_N}{dV_R})_6 = k_{6n} (P_N / P_I), n=6-9$	Hydrocracking of Naphthene
Aromatics _(n+1) + H ₂ → Aromatics _(n) + CH ₄	$-(\frac{dN_A}{dV_R})_7 = k_{7n} (P_{An+1} P_{H_2^{0.5}}), n=7-9$	Hydrodealkylation

2-2- موازنه جرم

برای پیدا کردن تغییرات غلظت، المانی استوانه‌ای از بستر کاتالیست موجود در داخل راکتور، در نظر گرفته و از اصل بقا جرم برای هر یک از اجزاء واکنش دهنده، معادله غلظت مربوطه استخراج می‌شود [7].

$$\frac{dN_R}{dV_R} = (r_{in} - r_{out} \pm r_{gen}) \Rightarrow \frac{dN_R}{dR} = 2\pi R L r_b (r_{in} - r_{out} \pm r_{gen})$$

$$\frac{dN_R}{dR} = 2\pi R L r_b$$

با بستن موازنه جرم برای کلیه اجزاء واکنش دهنده معادلات غلظت زیر بدست می‌آیند:

$$\left(\frac{dN_N}{dV_R}\right)_t = \left(\frac{dN_N}{dV_R}\right)_1 \pm \left(\frac{dN_N}{dV_R}\right)_2 + \left(\frac{dN_N}{dV_R}\right)_3 + \left(\frac{dN_N}{dV_R}\right)_6, \quad [+ \text{ for ACP and } - \text{ for ACH}]$$

$$\left(\frac{dN_A}{dV_R}\right)_t = -\left(\frac{dN_N}{dV_R}\right)_1 \pm \left(\frac{dN_A}{dV_R}\right)_7$$

$$\left(\frac{dN_{H_2}}{dV_R}\right)_t = -3\left(\frac{dN_N}{dV_R}\right)_1 + \left(\frac{dN_N}{dV_R}\right)_3 + \left(\frac{n-3}{3}\right)\left(\frac{dN_P}{dV_R}\right)_5 + \left(\frac{n-3}{3}\right)\left(\frac{dN_N}{dV_R}\right)_6 + \left(\frac{dN_A}{dV_R}\right)_7$$

2-3- موازنه انرژی

تغییرات دما در بستر کاتالیست، از روابط زیر حاصل می‌شود [7]:

$$dN_N \rightarrow \Delta H_N \rightarrow \Delta H_N + dN_N(ACP_n) \rightarrow N(ACH_n) \Delta H_N(ACP_n) \rightarrow N(ACH_n) + dN_N \rightarrow P \Delta H_N \rightarrow P +$$

$$dN_{NP_n} \rightarrow IP_n \Delta H_{NP_n} \rightarrow IP_n + dN_{PC} \Delta H_{PC} + dN_{NC} \Delta H_{NC} + dN_{A_{n+1}} \rightarrow A_n \Delta H_{A_{n+1}} \rightarrow A_n = F_t C_P dT$$

باتقسیم دو طرف معادله بالا بر $dV_R F_t C_P$ معادله دما به صورت زیر ساده می‌شود [7]:

$$\frac{dT}{dV_R} = \sum_{n=6}^9 \sum_{i=1}^7 (-\Delta H_{i_n}) \left(\frac{dN_R}{dV_R}\right)_i \times \frac{1}{F_t C_P} \Rightarrow \frac{dT}{dR} = 2\pi R L r_b \left(\sum_{n=6}^9 \sum_{i=1}^7 (-\Delta H_{i_n}) \left(\frac{dN_R}{dV_R}\right)_i \times \frac{1}{F_t C_P}\right)$$



3- روابط و داده‌های ترمودینامیکی

تابعیت دمایی ظرفیت حرارتی (C_p) و گرمای واکنش (ΔH) در معادله انرژی و انرژی آزاد گیبس (ΔG°) در محاسبه ثابت تعادل به صورت زیر در نظر گرفته شده است. ثابت سرعت واکنش از رابطه آرنیوس بدست می‌آید.

$$C_p = a + bT + cT^2 + dT^3$$

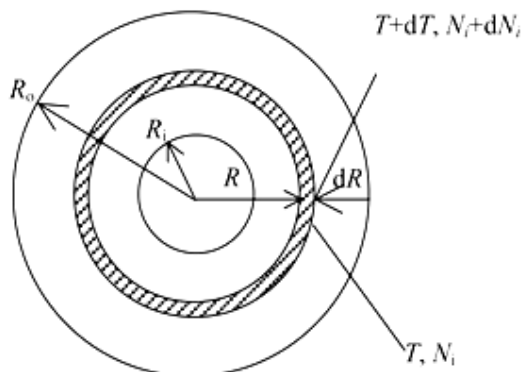
$$\Delta H_f^\circ = a' + b'T + c'T^2 + d'T^3$$

$$\Delta G^\circ = a'' + b''T + c''T^2 + d''T^3$$

4- شبیه‌سازی فرآیند تبدیل کاتالیستی

شکل (2) مدل فیزیکی جریان شعاعی در یک راکتور تبدیل کاتالیستی را نشان می‌دهد. شعاع خارجی راکتور R_0 می‌باشد. جریان ورودی المان دارای شدت مولی N_i و دمای T بوده و جریان خروجی از المان دارای شدت مولی $N_i + dN_i$ و دمای جریان خروجی $T + dT_i$ می‌باشد. به علت افت فشار کم در راکتورهای کاتالیستی، فشار را ثابت در نظر گرفته می‌شود [1].

جدول (1) شرایط عملیاتی راکتورها را نشان می‌دهد. با معلوم بودن ترکیب درصد غلظت ورودی به راکتورها و اعمال شرایط مرزی، مقادیر پارامترهای C_p و ΔH در هر مرحله از شعاع راکتور محاسبه می‌شوند. معادلات جرم و انرژی، با استفاده از روش عددی رانگ کوتای مرتبه چهار بطور همزمان حل می‌شوند تا تغییرات دما و غلظت هر یک از واکنشگرها در بستر کاتالیست بدست آید.



شکل 2. مدل فیزیکی راکتور تبدیل کاتالیستی با جریان شعاعی.

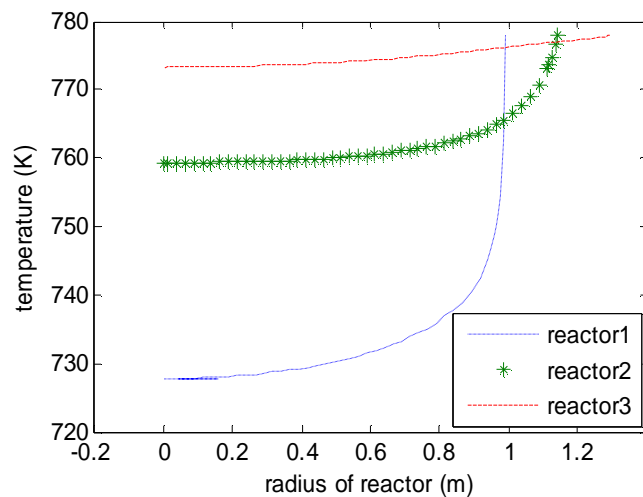


جدول 1. شرایط عملیاتی راکتورهای تبدیل کاتالیستی.

شماره راکتور	دمای ورودی (کلوین)	فشار ورودی (کیلو پاسکال)	شعاع راکتور (متر)	طول کاتالیست (متر)	جرم کاتالیست (کیلوگرم)	پارافین در ورودی (درصد مولی)	نفتن در ورودی (درصد مولی)	آروماتیک در ورودی (درصد مولی)
1	778	3100	0/9906	3/837	8646	64/35 %	11/86 %	23/78 %
2	778	2942	1/143	4/741	14223	62/88 %	8/58 %	28/55 %
3	778	2825	1/295	5/748	2245	49/13 %	2/37 %	47/89 %

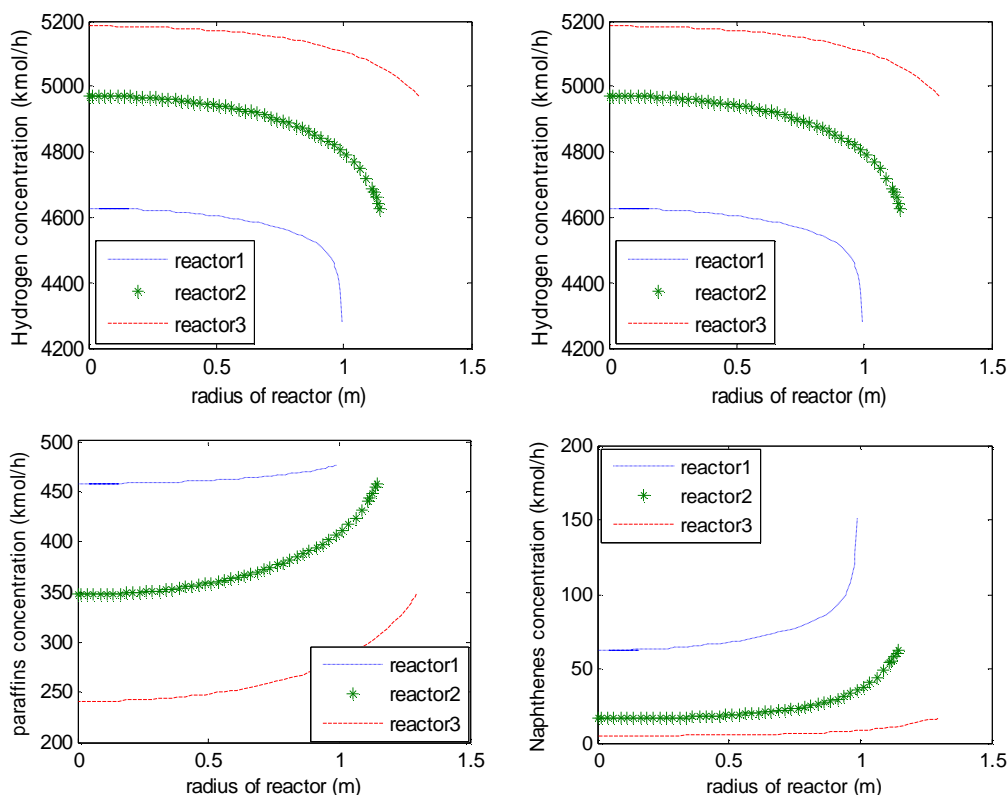
5- نتایج و بحث

در این مقاله، یک مدل سینتیکی، برای فرآیند تبدیل کاتالیستی راکتورهای پالایشگاه تهران ارائه شده است. در این راکتورها چند واکنش اصلی به صورت هم‌زمان رخ می‌دهند. شکل (3) تغییرات دما نسبت به شعاع سه راکتور را نشان می‌دهد. واکنش‌های گرمازا باعث می‌شوند که دما در داخل راکتورها افزایش یابد. میزان افزایش دما در راکتورهای تبدیل کاتالیستی متناسب با اختلاف میزان تبدیل در خروجی و ورودی راکتور (ΔX) است. اکثر واکنشگرها در راکتور اول به محصول تبدیل می‌شوند، بنابراین بیشترین اختلاف میزان تبدیل در راکتور اول است و این میزان با گذشت از راکتور کاهش می‌یابد بنحوی که کمترین اختلاف تبدیل در راکتور سوم است. بنابراین افزایش دما در راکتور اول بمراتب از راکتورهای دوم و سوم بیشتر است. اختلاف دما مرکز راکتور نسبت به شعاع راکتور بترتیب در راکتورهای اول، دوم و سوم در حدود 5، 20 و 50 درجه کلوین است. دیواره راکتورها عایق‌بندی است و گرمایی از راکتور خارج نمی‌شود بنابراین بیشترین تغییرات دما در نزدیکی دیواره هر راکتور است. گرمای ایجاد شده توسط واکنش‌های شیمیایی گرمازا، انرژی فعال‌سازی برای شروع واکنش‌های گرماگیر را تامین خواهد کرد.



شکل 3. تغییرات دمای سه راکتور نسبت به شعاع سه راکتور در بستر کاتالیستی.

شکل (2) روند تغییرات غلظت اجزاء نسبت به شعاع سه راکتور، در بستر کاتالیست را نشان می‌دهند. با توجه به داده‌های شکل (2) دریافت می‌شود که غلظت آروماتیک‌ها بطور پیوسته در این راکتورها افزایش می‌یابد و بخاطر غلظت بالای نفتن‌ها در راکتور اول، واکنش‌های دی‌هیدروژناسیون از سرعت بالایی برخوردار بوده و بیشترین افزایش غلظت آروماتیک‌ها در این راکتور دیده می‌شود. جزء مولی پارافین‌ها در راکتور اول ثابت بوده و گاهی با افزایش جزء مولی همراه است، ولی در راکتور دوم و سوم طی واکنش‌های فعال ایزومری و هیدروکراکینگ از غلظت پارافین‌ها کاسته می‌شود. با توجه به این که آروماتیک‌ها طی واکنش‌های دی‌هیدروژناسیون از نفتن‌ها حاصل می‌شوند، بیشترین تغییر غلظت برای نفتن‌ها در راکتور اول دیده می‌شود، نفتن‌ها از نوع واکنش‌گرهایی هستند که در واکنش‌های هیدروکراکینگ بیشتر از پارافین‌ها تمایل به مصرف شدن دارند و جزء مولی این واکنش‌گرها در خروجی راکتور سوم به صفر میل می‌کند. در هر دما و فشار جزئی هیدروکربن‌های C_6-C_9 برای نفتن‌ها در راکتور سوم به صفر میل می‌کند و مقدار ایزوپارافین‌ها از نرمال پارافین‌ها بیشتر می‌باشد. از محصولات جانبی و با ارزش این واحد هیدروژن می‌باشد که غلظت آن پیوسته در سه راکتور افزایش می‌یابد.



شکل 4. روند تغییرات غلظت هیدروژن، آروماتیک‌ها، پارافین‌ها نسبت به شعاع سه راکتور در بستر کاتالیست.

عدد اکتان، معیاری برای مشخص کردن کیفیت احتراق سوخت موتورهای درون سوز بوده و با تغییرات دما در راکتور و سرعت جریان خوراک در جریان بازگشتی و خواص خوراک حدس زده شده و کنترل می‌گردد. بدلیل بالا بودن عدد اکتان پارافین‌های شاخه‌دار و آروماتیک‌ها، در واحدهای تبدیل کاتالیستی سعی می‌شود با شاخه دار کردن و تولید محصولات آروماتیکی عدد اکتان را افزایش دهند. بیشترین تغییر در مقدار عدد اکتان مربوط به راکتور اول و کمترین تغییر مربوط به راکتور سوم می‌باشد. هر چه افت دما در راکتورها کمتر شود مقدار عدد اکتان بیشتر می‌شود. بنابراین در راکتور سوم بیشترین مقدار عدد اکتان وجود دارد. آنالیز نتایج شبیه سازی با مقادیر واقعی عدد اکتان و بازده حجمی در جدول (2) نشان داده شده است.

جدول 2. آنالیز نتایج مدل سازی با مقادیر تجربی عدد اکتان و بازده حجمی در بستر کاتالیستی.

مقادیر تجربی	مدلسازی	خطای نسبی (%)	
97/5	98/81	13/4	عدد اکتان
76	67/4	11/3	بازده حجمی



جدول (3) نتایج مدل‌سازی با مقادیر تجربی، افت دما و ترکیب درصد اجزاء در خروجی راکتورها را نشان می‌دهد.

جدول 3. آنالیز نتایج مدل‌سازی با مقادیر تجربی، افت دما و ترکیب درصد اجزاء در خروجی راکتورها.

ردیف	تغییرات دمای تجربی (K)	تغییرات دمای مدل‌سازی (K)	وزن مولکولی متوسط	درصد مولی آروماتیک	درصد مولی پارافین	درصد مولی نفتن
1	53/33	50/33	19/5918	% 28/55	% 62/88	% 8/58
2	18/33	18/8	18/4653	% 47/89	% 49/13	% 2/37
3	3/88	4/8	17/732	% 62/99	% 36/27	% 0/74

6- نتیجه‌گیری

نتایج مدل‌سازی ارائه شده، حاکی از آن است که مدل سینتیکی که برای فرآیند تبدیل کاتالیستی راکتورهای پالایشگاه تهران ارائه شده، با خطای قابل قبولی منطبق بر داده‌های تجربی است. از نتایج تغییرات عدد اکتان محصول رفرمیت طی یک بازه‌ی زمانی می‌توان به فعالیت کاتالیزور در راکتورها پی برد. بیشترین مقدار عدد اکتان در راکتور سوم وجود دارد.

مراجع

- [1] W. Hou, H. Su, Y. Hu, J. Chu, Modeling, Simulation and Optimization of a Whole Industrial Catalytic Naphtha Reforming Process on Aspen Plus Platform, Chinese Journal of Chemical Engineering, 14 (2006) 584-591.
- [2] L.M. Rodríguez Otal, T. Viveros García, M. Sánchez Rubio, A model for catalyst deactivation in industrial catalytic reforming, in: C.H. Bartholomew, G.A. Fuentes (Eds.) Studies in Surface Science and Catalysis, Elsevier, 1997, pp. 319-325.
- [3] K. Uematsu, T. Nishida, M. Kowada, Some applications of semi-regenerative processes to two-unit warm standby system, Microelectronics Reliability, 24 (1984) 965-977.
- [4] C.L. Pieck, E.L. Jablonski, J.M. Parera, Recovering of the catalytic functions of naphtha reforming catalysts by partial coke burning, Applied Catalysis, 70 (1991) 19-28.
- [5] A.A. Ballut, Energy conservation in a catalytic reforming plant, Heat Recovery Systems and CHP, 9 (1989) 493-497.
- [6] H.O.U. Weifeng, S.U. Hongye, M.U. Shengjing, C.H.U. Jian, Multiobjective Optimization of the Industrial Naphtha Catalytic Reforming Process, Chinese Journal of Chemical Engineering, 15 (2007) 75-80.
- [7] J. Ancheyta-Juárez, E. Villafuerte-Macías, Experimental validation of a kinetic model for naphtha reforming, in: G.F. Froment, K.C. Waugh (Eds.) Studies in Surface Science and Catalysis, Elsevier, 2001, pp. 615-618.



Modeling and Numerical Simulation of Catalytic Reforming Reactors of Tehran Refinery

Reza Khavari Kohneh Shahri, Mahmoud Salimi, Mashallah Rezakazemi, Saeed Shirazian*

Corresponding Author Address: Department of Chemical Engineering, Islamic Azad University-Arak Branch

**Corresponding Author E-mail: shirazian@iust.ac.ir*

Abstract

In this work, a kinetic model was proposed for simulation of catalytic reforming process. The feed of catalytic reforming units is heavy naphtha including paraffin, naphthenic compounds and aromatics with 6-9 carbons. Major reactions occurred in the catalytic reactor include dehydrogenation, dehydrocyclisation, isomerisation, hydrocracking and ring opening which react simultaneously. A cylindrical element of catalyst is considered to obtain conservation equations including mass and energy balances. The derived equations are solved by numerical method using MATLAB software to simulate catalytic reforming reactors of Tehran refinery. Modeling findings involving concentration, temperature and octane number variations were evaluated. Furthermore, simulation results were compared with experimental data and confirmed the accuracy of the proposed model.

Keywords: Kinetic model, Catalytic reforming process, Modeling, Numerical simulation.