

## بررسی اثر غلظت اکسیژن بر میزان بازیافت گوگرد و دمای احتراق کوره واکنشی پالایشگاه نفت آبادان

عباس کوثری نیا\*<sup>1</sup>، پدram عبدلی<sup>2</sup>، مسعود نعمت الهی<sup>3</sup>

<sup>1</sup> استادیار، گروه مهندسی مکانیک، واحد اهواز، دانشگاه آزاد اسلامی، اهواز، ایران

<sup>2</sup> کارشناس ارشد، گروه مهندسی مکانیک، واحد اهواز، دانشگاه آزاد اسلامی، اهواز، ایران

<sup>3</sup> کارشناس پژوهش شرکت پالایش نفت آبادان، آبادان، ایران

نوع مقاله: ترویجی

دریافت: 1397/11/21 پذیرش: 1398/07/02

### چکیده

در این مقاله، اثر یک پارامتر جهت افزایش دمای کوره واکنش و میزان بازیافت گوگرد واحد بازیافت گوگرد پالایشگاه نفت آبادان، توسط نرم افزار شبیه ساز عددی فلوئنت مورد بررسی قرار گرفته است. داده های خروجی مانند دمای کوره واکنش و جزء مولی محصولات احتراق در خروجی با داده های تجربی اعتبارسنجی شده اند. اثر غنی سازی اکسیژن بر روی دمای کوره واکنش و میزان بازیافت گوگرد توسط نرم افزار ذکر شده مورد مطالعه قرار گرفته است. در شرایطی که غلظت اکسیژن افزایش پیدا می کند، دمای احتراق به صورت یکنواخت افزایش پیدا کرده و نتایج نشان می دهند که میزان بازیافت گوگرد در بیشینه غلظت اکسیژن، به حداکثر مقدار خود می رسد. در این شبیه سازی از مدل اغتشاش و مدل احتراقی اضمحلال گردابه ای استفاده شده است.

**کلمات کلیدی:** بازیافت گوگرد، غلظت اکسیژن، کوره واکنش، واحد کلاوس، شبیه سازی عددی

## 1- مقدمه

واحد بازیافت گوگرد، یک واحد مهم در فرآیند پالایش نفت و گاز می‌باشد. این واحد سولفید هیدروژن را از خوراک گاز اسیدی قبل از اینکه در محیط آزاد شود، جدا می‌کند [1]. به طور کلی سولفید هیدروژن به عنوان محصول جانبی نامطلوب واحد پالایش نفت و گاز می‌باشد [2]. فرآیندهای مختلفی جهت بازیافت گوگرد از گاز سولفید هیدروژن به کار بسته شده‌اند. فرآیند کلاوس پرکاربردترین فرآیند جهت محقق کردن این امر می‌باشد [3، 1]. شایان ذکر است که اصلاحات زیادی جهت افزایش میزان بازیافت گوگرد بر روی فرآیند اصلی کلاوس انجام شده است. حداقل بازده مورد قبول بازیافت گوگرد برای واحدهای پالایش گاز و پالایشگاه‌هایی که با میزان 10LT/d یا مقدار بیشتر گاز طبیعی سر و کار دارند، در محدوده 99/8 - 97/5 می‌باشد [4]. اخیراً مطالعات زیادی بر روی کوره واکنش کلاوس انجام گرفته است. اگر مقدار جریانی که به کوره واکنش فرستاده می‌شود در جدا کننده افزایش یابد، در ابتدا دمای برنر اصلی به حداکثر مقدار خود افزایش می‌یابد، اما اگر جریان ورودی دوباره افزایش پیدا کند، دمای برنر اصلی به شدت کاهش می‌یابد. این مساله برای هر سه حالت غلظت اکسیژن نیز صدق می‌کند [5]. با این حال اگر غلظت سولفید هیدروژن، نسبت سولفید هیدروژن به دی اکسید گوگرد و نرخ جریان هوا افزایش یابند، دمای برنر اصلی افزایش پیدا می‌کند. در این مقاله، فرآیند احتراق در کوره واکنش واحد کلاوس شبیه‌سازی شده و همچنین اثر غلظت اکسیژن بر دمای کوره و میزان بازیافت گوگرد بررسی شده است. به همین منظور هوای ورودی به سه دسته از نظر ترکیبات اکسیژن موجود در آن‌ها تقسیم بندی می‌شود. در دسته اول، دوم و سوم به ترتیب مقدار اکسیژن در هوای ورودی 5 درصد، 10 درصد و 20 درصد افزایش می‌یابد. شکل 1 دیاگرام جریان واحد کلاوس را نشان می‌دهد. در این فرآیند، گاز اسیدی (سولفید هیدروژن و سوخت گازی) وارد واحد بازیافت گوگرد شده و در تفکیک‌گر به دو جریان تقسیم می‌شود. یک قسمت از جریان به برنر اصلی، و قسمت دیگر جریان به گرم‌کن جهت هیدرولیز ترکیبات گوگردی و تبدیل آن‌ها به سولفید هیدروژن فرستاده می‌شود. 1/3 سولفید هیدروژن ورودی در اثر احتراق با هوای ورودی در برنر اصلی به دی اکسید گوگرد تبدیل می‌شود.



واکنش فوق مقدار بسیار زیادی گرما آزاد می‌کند. علاوه بر این، محصولات احتراق واکنش فوق امکان رخ دادن واکنش کلاوس بین سولفید هیدروژن و دی اکسید گوگرد را فراهم می‌کنند.

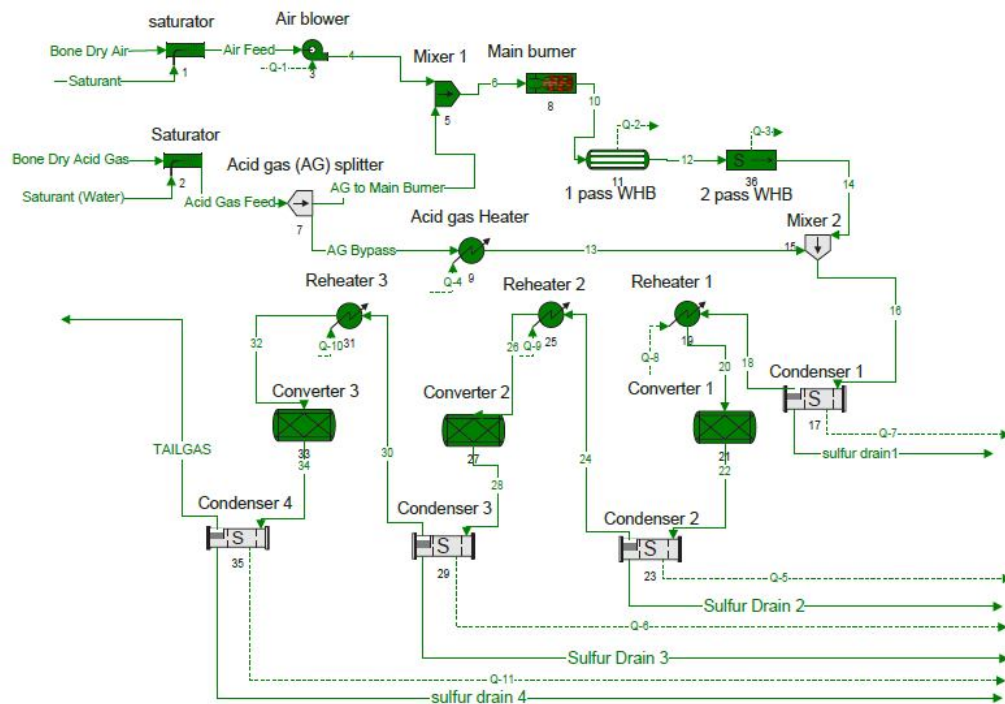


مقدار n در واکنش فوق می‌تواند در محدوده 6-8 باشد. واکنش (2)، یک واکنش گرمازا و برگشت‌پذیر است، بنابراین، فرآیند تحت شرایط آدیاباتیک باعث افزایش دما می‌شود. جریان گاز پس از کوره واکنش از مبدل حرارتی اول جهت بازیابی گرما و تولید بخار فشار بالا عبور می‌کند [6، 1]. عبور از مبدل حرارتی دوم جایی است که توزیع مجدد S<sub>2</sub> تا S<sub>8</sub> واکنش ابتدایی می‌باشد که رخ می‌دهد. در این قسمت بخارات گوگرد به گوگرد مایع تبدیل می‌شود. باید توجه داشت که واکنش‌های جانبی که شامل هیدروکربن‌ها و دی اکسید کربن موجود در گاز اسیدی ورودی می‌باشند، می‌توانند منجر به تشکیل کربونیل سولفید و کربن دی سولفید در کوره واکنش شوند [7]. جریان خروجی از مبدل حرارتی دوم و گرم‌کن گاز اسیدی در کندانسور اول سرد شده تا گوگرد مایع بازیابی شود. جریان گاز خروجی از

کندانسور اول در بازگرم کن اول پیش گرم شده و به بستر کاتالیستی، جایی که واکنش کلاوس در دمایی پایین تر اتفاق می افتد، فرستاده می شود. این امر باعث تبدیل تعادلی بالاتری می شود به این دلیل که فرآیند کلاوس گرمازا می باشد. معمولاً، کربونیل سولفید و کربن دی سولفید در کاتالیزور اول طبق واکنش گرمازا زیر هیدرولیز می شوند.



کانورتر مرحله اول به اندازه کافی در دمای بالا برای هیدرولیز کربونیل سولفید و کربن دی سولفید نگه داشته می شود. ون و همکاران در سال 1987 [8]، پیش بینی تجربی مونوکسید کربن، کربونیل سولفید، کربن دی سولفید و هیدروژن را توسط حداقل محاسبات تعادل انرژی آزاد مورد مطالعه قرار دادند. مطالعه ای توسط داوولینگ در سال 1990 [9]، از دانشگاه کلگری کانادا<sup>1</sup>، واکنش تجزیه سولفید هیدروژن به هیدروژن و گوگرد که یکی از واکنش هایی می باشد که در کوره اتفاق می افتد و سینتیک آن بیانگر این موضوع است که این واکنش بسیار سریع انجام می شود، مورد مطالعه قرار داد. این واکنش، یک واکنش برگشت پذیر است به طوری که در دمای پایین واکنش رو به جلو، و در دمای بالا معکوس واکنش اتفاق می افتد. سینتیک فراهم شده برای واکنش رو به جلو، واکنش مرتبه اول سولفید هیدروژن و برای واکنش برگشتی (تولید سولفید هیدروژن) نیز واکنش از مرتبه اول می باشد. سینتیک واکنش تشکیل کربونیل سولفید از طریق ترکیب مونوکسید کربن و سولفید هیدروژن مشخص شده است. زارع نژاد و حسین پور [10] داده های واقعی را با داده های روش حداقل انرژی آزاد گیبس مقایسه کردند و به این نتیجه رسیدند که داده های مربوط به روش حداقل انرژی آزاد گیبس تطابق خوبی با داده های واقعی دارند.



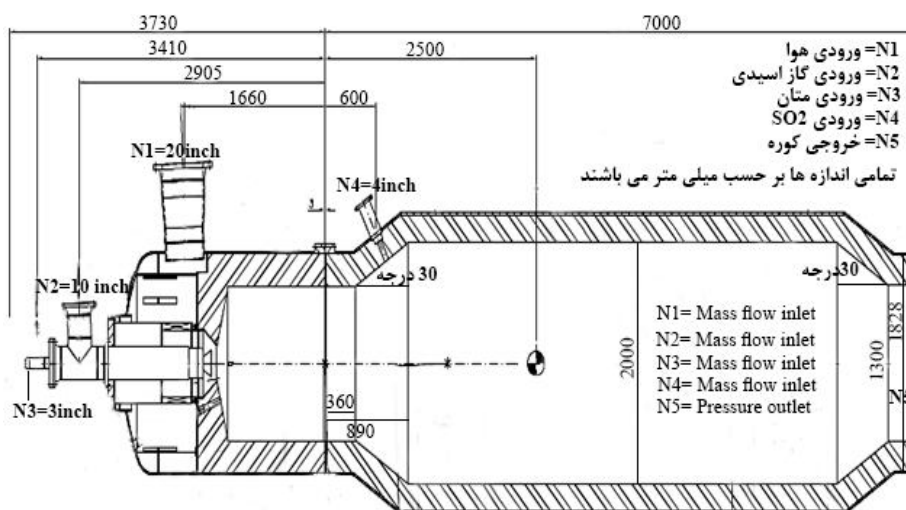
شکل 1. دیاگرام جریان فرآیند کلاوس [11]

در این مقاله فرآیند احتراق در کوره واکنش با داده‌های تجربی پالایشگاه آبادان اعتبارسنجی شده و روشی جهت افزایش دمای احتراق کوره واکنش و افزایش درصد گوگرد تولیدی پیشنهاد شده است. اساس کار به این صورت می‌باشد که نسبت مولی اکسیژن ورودی نسبت به حالت واقعی در سه حالت افزایش پیدا می‌کند. در حالت واقعی نسبت مولی اکسیژن ورودی 19 درصد بوده که در حالت‌های بهینه‌سازی به مقدار 5، 10 و 20 درصد افزایش یافته و افزایش دمای احتراق و کاهش آلاینده‌های حاصل از احتراق مانند کربونیل سولفید و کربن دی سولفید به علاوه میزان افزایش تولید گوگرد در خروجی مورد بحث و بررسی قرار می‌گیرد.

### مدل‌سازی هندسی

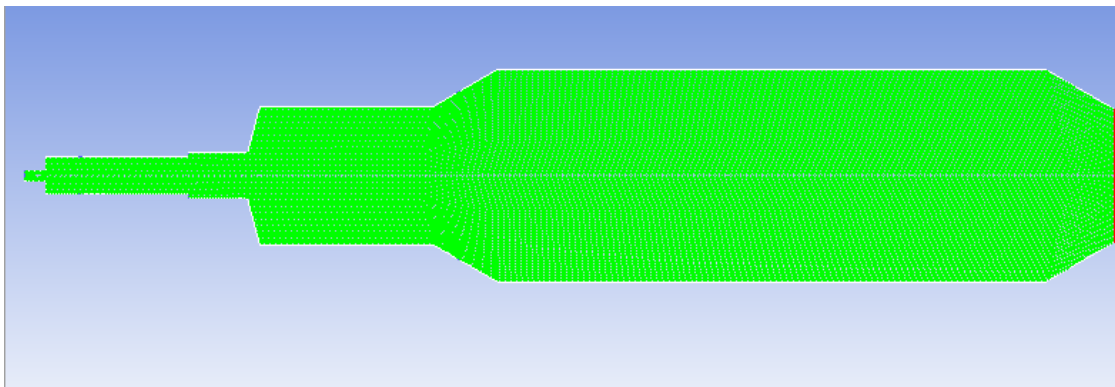
کوره شبیه‌سازی شده، کوره‌ای استوانه‌ای به طول، 10730 میلی‌متر، و قطر 2000 میلی‌متر می‌باشد. کوره دارای چهار عدد ورودی، شامل ورودی هوا، گاز سولفید هیدروژن به عنوان سوخت اصلی، گاز متان و دی‌اکسید گوگرد می‌باشد، که سه ورودی اول بر روی مشعل در ورودی کوره قرار داشته، و ورودی دی‌اکسید گوگرد بر روی خود کوره قرار گرفته است. هندسه کوره به صورت متقارن محور در نظر گرفته شده است. ورودی سوخت اصلی و هوا برابر با 40 میلی‌متر، ورودی متان و دی‌اکسید گوگرد برابر با 50 میلی‌متر می‌باشد. مدل ابتدا رسم شده و شبکه‌بندی مناسب هندسه، انتخاب گردیده و برای تحلیل به کمک نرم‌افزار فلونت آماده شده است. شکل 2، هندسه کوره و شکل 3 مدل ایجاد شده در نرم افزار فلونت را نشان می‌دهد.

با توجه به دو بعدی بودن هندسه و زمان اجرا، هزینه‌های محاسباتی و پراکندگی عددی از شبکه چهار ضلعی<sup>2</sup> در نرم‌افزار ورک‌بنچ<sup>3</sup> استفاده شده است. شرایط مرزی در تمام ورودی‌ها به صورت دبی ورودی<sup>4</sup> در نظر گرفته شده است. شرط مرزی خروجی کوره به صورت فشار خروجی<sup>5</sup> و دیواره کوره عایق می‌باشد. شرایط ورودی کوره واکنش در جدول 1 ذکر شده‌اند.



شکل 2. هندسه کوره واکنش [13]

- 2- Quadrilaterals
- 3- Workbench
- 4- Mass flow inlet
- 5- Pressure outlet



شکل 3. مدل ورودی از قسمت شبکه بندی به فلوئنت

جدول 1. شرایط مرزی ورودی های کوره واکنش [13]

گونه ها	گاز اسیدی (درصد مولی)	هوای ورودی (درصد مولی)	متان (درصد مولی)	دی اکسید گوگرد (درصد مولی)
	80°C	190°C	40°C	51°C
H <sub>2</sub>	0/00066			
Ar		0/00855		
O <sub>2</sub>		0/19291		
N <sub>2</sub>		0/71878		
CH <sub>4</sub>	0/00725		1	
CO <sub>2</sub>	0/10152	0/00028		
H <sub>2</sub> S	0/68952			
SO <sub>2</sub>				0/90728
H <sub>2</sub> O	0/147	0/07948	0	0/09272
NH <sub>3</sub>	0/05274			
	دبی گازهای اسیدی ورودی (kg/s)	دبی گاز متان ورودی (kg/s)	دبی هوای ورودی (kg/s)	دبی دی اکسید گوگرد ورودی (kg/s)
	1/338	0/09028	3/1025	0/25167
	0/6bar	0/6bar	2/8bar	0/689bar

جهت اعتبارسنجی هندسه پنج شبکه بندی متفاوت ایجاد شده که شامل المان های درشت، متوسط و ریز می باشد. در نهایت شبکه ای با تعداد 25263 المان انتخاب شده است که از لحاظ زمان محاسباتی بهینه بوده و جواب های خروجی کمترین خطا را نسبت به حالت واقعی داشته باشد.

### معادلات حاکم

معادله بقای جرم یا همان معادله پیوستگی، در حالت کلی به صورت زیر نوشته می‌شود.

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \quad (5)$$

در مختصات کارتزین معادله بقای اندازه حرکت به شکل زیر بسط پیدا می‌کند.

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (6)$$

حل عددی مستقیم معادله ناویر-استوکس به ظرفیت محاسباتی خیلی زیادی نیاز دارد و به ندرت در تحقیقات مهندسی به کار می‌رود. در مسائل، بیشتر از روش میانگین‌گیری زمانی استفاده می‌شود. معادلات میانگین‌گیری شده پیوستگی و مومنتوم به صورت زیر می‌باشند.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \bar{u}_i) = 0 \quad (7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j \bar{u}_i) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial R_{ij}}{\partial x_j} \quad (8)$$

که در معادله فوق،  $R_{ij}$  به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$R_{ij} = \overline{\rho u'_i u'_j} \quad (9)$$

تنها تفاوت معادله مومنتوم فوق با معادله مومنتوم با کمیت‌های لحظه‌ای اضافه شدن عبارت آخر در سمت راست معادله (8)، یعنی  $\overline{\rho u'_i u'_j}$  می‌باشد. این عبارت اصطلاحاً تنش آشفتگی یا تنش رینولدز نامیده می‌شود، که یک مومنتوم مرتبه دوم می‌باشد. به طور کلی این عبارت از لحاظ فیزیکی یک تنش نمی‌باشد بلکه بیان‌گر اثر تبادل اینرسی (مومنتوم) می‌باشد. این عبارت از سمت چپ معادله مومنتوم یعنی جایی که با عبارت‌های اینرسی سر و کار داریم به سمت راست منتقل شده است. بنابراین ریشه و بنیان این عبارت از جنس اینرسی می‌باشد. بوزینسک تنش‌های رینولدز را از طریق یک لزجت متلاطم  $\mu_t$  به میانگین زمانی سرعت‌ها ارتباط داد.

$$-\overline{\rho u'_i u'_j} = \mu_t \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho K \delta_{ij} \quad (10)$$

نقطه آغاز تمام مدل‌های دو معادله‌ای خطی استفاده از تقریب بوزینسک و نیز ارائه یک معادله انتقالی برای انرژی جنبشی آشفتگی  $K$  می‌باشد. انتخاب متغیر دوم کاملاً دلخواه است و تا امروز پیشنهادات بسیاری برای این انتخاب ارائه شده است. در مدل‌های ویسکوزیته  $k - \varepsilon$ ، میدان آشفتگی بر حسب دو متغیر بیان می‌شود:

(الف) انرژی جنبشی جریان آشفته<sup>6</sup> ( $K$ )

(ب) نرخ اضمحلال ویسکوز انرژی جنبشی آشفته<sup>7</sup> ( $\varepsilon$ )

6- Turbulent Kinetic Energy

7- Viscous Dissipation Rate of Turbulent Kinetic Energy

$$K = \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i} \quad (11)$$

$$\varepsilon = \left( \frac{\mu}{\rho} \right) \overline{u'_{ij} u'_{ij}} \quad (12)$$

مقدار ویسکوزیته آشفته را می‌توان به صورت زیر در نظر گرفت.

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (13)$$

در معادله فوق،  $C_\mu$  یک ضریب تجربی است که مقدار آن را معمولاً برابر 0/09 در نظر می‌گیرند [12]. در مدل استاندارد  $k - \varepsilon$ ، مقادیر  $k$  و  $\varepsilon$  توسط معادله‌های نیمه تجربی زیر بدست می‌آیند.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho k) + (\rho u_j k)_{,j} = \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) k_{,j} \right]_{,j} + G - \rho \varepsilon \quad (14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \varepsilon) + (\rho u_j \varepsilon)_{,j} = \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \varepsilon_{,j} \right]_{,j} + C_1 \frac{\varepsilon}{k} G - C_2 \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (15)$$

در معادلات فوق،  $C_1$  و  $C_2$  ضرایب تجربی بوده و  $\sigma_k$  و  $\sigma_\varepsilon$  نیز اعداد پرانتل می‌باشند. عبارات  $C_1 \left( \frac{\varepsilon}{k} \right) G$  و  $C_2 \rho \left( \frac{\varepsilon^2}{k} \right)$  در معادله (15) به ترتیب بیانگر فرآیندهای تولید برشی  $\varepsilon^8$  و فرآیندهای اضمحلال ویسکوز  $\varepsilon$  هستند. در معادله (14) عبارت  $G$  بیانگر میزان تولید انرژی جنبشی آشفته ناشی از اندرکنش بین جریان متوسط<sup>9</sup> و میدان جریان آشفته می‌باشد و از همین رو به آن اصطلاحاً عبارت تولید برشی گفته می‌شود. رابطه صریح برای  $G$  به صورت زیر است:

$$G \approx \mu_t (u_{i,j} + u_{j,i}) u_{i,j} \quad (16)$$

ثوابت معادلات (14) و (15) عبارتند از [12]:

$$C_1 = 1.44 \quad C_2 = 1.92 \quad C_\mu = 0.09 \quad \sigma_k = 1.0 \quad \sigma_\varepsilon = 1.3 \quad (17)$$

حالت کلی معادله بقای انرژی را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\vec{v}(\rho E + p)) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ k_{eff} \frac{\partial T}{\partial x_j} - \sum_j h_j \vec{J}_j + (\vec{\tau}_{eff} \cdot \vec{v}) \right] + S_h - \nabla \cdot (q_r) \quad (18)$$

در این معادله،  $k_{eff}$ ، رسانایی موثر بوده و  $\vec{J}_j$  شار نفوذ جزء شیمیایی  $j$  می‌باشد. سه جمله اول سمت راست معادله فوق، به ترتیب بیانگر رسانایی حرارتی، نفوذ اجزاء شیمیایی و اتلاف لزج هستند. عبارت مولد  $S_h$  شامل گرمای واکنش شیمیایی می‌باشد.

$$k_{eff} = k + k_t \quad (19)$$

در معادله (19)،  $k_t$  ضریب هدایت حرارتی توربولانسی می‌باشد. در معادله (18)، انرژی به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$E = h - \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2} \quad (20)$$

که در آن انتالپی محسوس، برای گازهای ایده‌آل بصورت زیر تعریف می‌شود.

$$h = \sum_j Y_j h_j \quad (21)$$

$Y_j$ ، کسر جرمی جزء شیمیایی  $j$  می‌باشد و  $h_j$  از رابطه زیر بدست می‌آید.

$$h_j = \int_{T_{ref}}^T C_{p,j} dT \quad (22)$$

دمای مرجع،  $T_{ref}$ ، 298/15 درجه کلوین می‌باشد. همان‌طور که گفته شد، عبارت مولد  $S_{in}$  در معادله (18)، شامل تولید انرژی حرارتی به واسطه انجام واکنش شیمیایی می‌باشد. عبارت  $(q_r)$  - $\nabla$  می‌تواند به طور مستقیم در معادله انرژی به عنوان چشمه حرارت (یا چاه) بدلیل تابش جایگزین شود. در فضاهایی که دارای مناطقی با دماهای متفاوت هستند، مانند داخل کوره‌ها و محفظه‌های احتراق که شامل سطوح و گازهای مختلف نشردهنده و جذب کننده شارهای حرارتی تابشی می‌باشند، نیاز به مدلی است که انتقال حرارت تابشی را با دقت و هزینه محاسباتی مناسب تقریب بزند. مدل تابش، شار حرارتی را بین سطوح و گازهای مختلف محاسبه و امکان پیشگویی دقیق توزیع دما را در نقاط مختلف فراهم می‌کند. اضافه کردن مدل تابش به شبیه‌سازی احتراق باعث دقیق‌تر شدن نتایج و همچنین باعث پیش‌بینی بهتر آلاینده‌ها می‌شود. مدل P1 دارای معایب و مزایایی می‌باشد. این مدل برای مسائل احتراقی که دارای ضخامت نوری زیاد می‌باشند نیز مناسب است و به راحتی با هندسه‌های پیچیده و مختصات منحنی الخط تطابق پیدا می‌کند. فلاکس تابشی،  $q_r$  برای این مدل از رابطه (23) محاسبه می‌شود:

$$q_r = -\frac{1}{3(a+\sigma s)-C\sigma s} \nabla G \quad (23)$$

که  $a$  ضریب نشر می‌باشد،  $G$  تابع پرتو و  $C$  ضریب تابع فاز غیر ایزوتروپیک خطی می‌باشد. با معرفی پارامتر  $\Gamma$  به صورت:

$$\Gamma = \frac{1}{3(a+\sigma s)-C\sigma s} \quad (24)$$

با ساده‌سازی داریم:

$$q_r = -\Gamma \nabla G \quad (25)$$

معادله انتقال برای ترم  $G$  به صورت:

$$\nabla \cdot (\Gamma \nabla G) - aG + 4an^2 \sigma T^4 = S_G \quad (26)$$

که در آن  $n$  ضریب شکست محیط،  $\sigma$  ثابت استفان بولتزمن بوده و  $S_G$  منبع تابش تعریف شده توسط کاربر می‌باشد. انسیس فلونت<sup>10</sup> برای مشخص کردن شدت تابش محلی معادله (26) را حل می‌کند زمانی که مدل P1 فعال می‌شود. با ترکیب معادلات (25) و (26)، معادله (27) بدست می‌آید:



$$-\nabla \cdot (q_r) = aG - 4an^2\sigma T^4 \quad (27)$$

بیشتر سوخت‌ها سریع‌سوز هستند و آنچه سرعت سوختن را محدود می‌کند اختلاط آشفته‌گی است. به عنوان مثال در احتراق‌های غیر پیش مخلوط سرعت سوختن بالا با اختلاط آهسته سوخت و اکسیدکننده محدود می‌شود و در احتراق‌های پیش مخلوط این سرعت بالا با اختلاط آهسته واکنش دهنده‌های سرد و محصولات احتراق داغ محدود می‌شود. به دلیل همین محدود شدن سرعت سوختن دیگر نیازی به نرخ‌های سینتیک شیمیایی پیچیده و معمولاً ناشناخته نیست و قابل صرف نظرند. برای این مورد فلوئنت مدل ارائه شده در روابط زیر را استفاده می‌کند که حاصل کار مگناسن و جرتاگر<sup>11</sup> است. نرخ تولید گونه  $\dot{m}$  به واسطه واکنش  $r$  ام  $(R_{i,r})$  مقدار کوچکتر دو رابطه (28) و (29) است. عبارت  $R_{i,r}$  از روش اتلاف گردابه‌های مغشوش کنترل می‌شود. یکی از این مدل‌ها بدین ترتیب است که برای نرخ واکنش، از میان دو مقدار زیر، مقدار کوچکتر در نظر گرفته می‌شود:

$$R_{i,r} = v'_{i,r} M_{w,i} A \rho \frac{\epsilon}{k} \min_R \left( \frac{Y_R}{v'_{r,R} M_{w,R}} \right) \quad (28)$$

$$R_{i,r} = v'_{i,r} M_{w,i} A B \rho \frac{\epsilon}{k} \min_R \left( \frac{\sum_P Y_R}{\sum_j^N v'_{j,r} M_{w,j}} \right) \quad (29)$$

که در آن  $M_{w,i}$  وزن مولکولی جزء  $i$  می‌باشد.  $v'_{i,r}$  ضریب استوکیومتریکی برای واکنش دهنده  $i$  در واکنش  $r$  می‌باشد.  $Y_P$  کسر جرمی یکی از گونه‌های درون محصولات احتراق می‌باشد.  $Y_R$  کسر جرمی یکی از گونه‌های مشخص واکنش دهنده‌ها می‌باشد.  $A$  ثابت تجربی که در نرم افزار برابر با 4 در نظر گرفته می‌شود.  $B$  ثابت تجربی که در نرم افزار برابر با 0/5 است.

دو رابطه بالا یکی بر حسب محصولات و دیگری بر حسب واکنش دهنده‌ها بیان شده که هر کدام نرخ محدودکننده واکنش را با توجه به کسر جرمی مربوطه و مقیاس زمانی جریان مغشوش محاسبه می‌کند و از بین این دو مقدار، نرخ واکنش کوچکتر به عنوان نرخ کنترل‌کننده واکنش مورد استفاده قرار می‌گیرد. در روابط ذکر شده در بالا، نرخ واکنش به وسیله مقیاس زمانی اختلاط گردابه‌ای بزرگ<sup>12</sup> یا همان  $k/\epsilon$  تعیین می‌شود. در این مدل هر جا که آشفته‌گی وجود داشته باشد،  $k/\epsilon \gg 0$ ، احتراق به پیش خواهد رفت و نیازی به منبع ایجاد جرقه نیست به همین دلیل احتراق‌های غیر پیش مخلوط مشکلی با این مدل ندارند.

## نتایج

پس از مدل‌سازی فرآیند احتراق در نرم‌افزار فلوئنت خروجی‌های دمای احتراق و جزء مولی محصولات واکنش با داده‌های تجربی مربوط به پالایشگاه آبادان در جدول 2 مقایسه شده و میزان خطای نسبی مربوط به دمای واکنش و محصولات احتراق محاسبه شده است. همان‌طور که در این جدول نشان داده شده، اعتبارسنجی برای دو نوع از خروجی‌ها انجام شده است. نوع اول، دمای خروجی از کوره است که میزان خطای آن کم‌تر از 2/5 درصد است. نوع دوم از خروجی‌ها شامل اجزایی است که در کوره تولید شده و یا علی‌رغم این که در ورودی وجود داشتند، مقدار آن‌ها

11- Magnussen & Hjertager

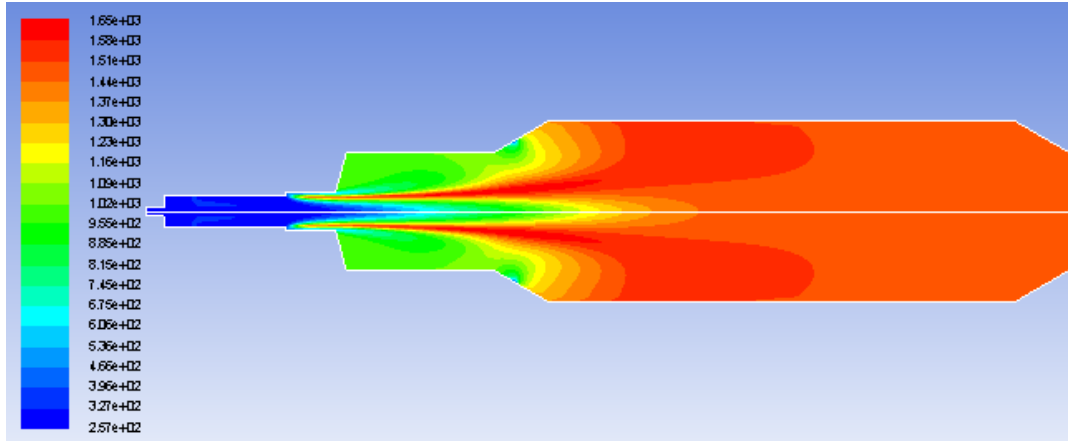
12- large eddy mixing time scale

به طور قابل ملاحظه‌ای کاهش نیافته است. بیشینه خطا برای این دسته از اجزاء کم‌تر از 10 درصد بوده است. دلایل اختلاف با نتایج تجربی را می‌توان به سه دسته تقسیم کرد. دسته اول مربوط به ساده‌سازی‌های هندسی انجام شده در حل است. با توجه به اینکه هندسه اصلی به صورت کامل سه بعدی بوده است و در اینجا از فرض تقارن محوری استفاده شده است، مطمئناً مقداری خطا وارد نتایج عددی گردیده است. دلیل دوم را می‌توان تفاوت در مقادیر ورودی با مقادیر واقعی برشمرد. مواردی نظیر شدت توربولانسی ورودی‌ها و یا دبی واقعی (معمولاً در هنگام تست مقداری نوسان در ورودی‌ها اتفاق می‌افتد) از داده‌های تجربی در دسترس نبوده و معمولاً این مقادیر اصلاً گزارش نمی‌شود. دلیل سوم اختلاف بین مقادیر عددی به دست‌آمده با مقادیر تجربی را می‌توان خطای اندازه‌گیری مقادیر تجربی دانست.

جدول 2. اعتبارسنجی جواب‌های حل عددی با داده‌های تجربی

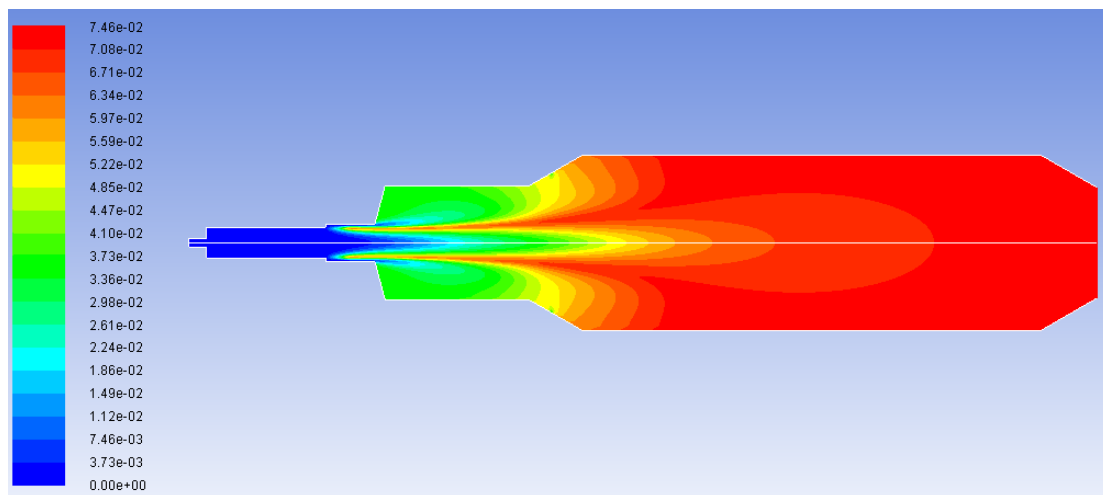
	داده‌های تجربی	داده‌های حل عددی	درصد خطا (نسبی)
دما	1529	1495	2/22367560
اجزائی که در کوره تولید شده و یا مقدار آن‌ها کم‌تر از 50 درصد کاهش یافته است.			
H <sub>2</sub> O	0/292251	0/301	2/99365955
S <sub>2</sub>	0/070975	0/0728	2/57132793
SO <sub>2</sub>	0/023046	0/0249	8/04478000
H <sub>2</sub>	0/032899	0/034	3/34660627
CO <sub>2</sub>	0/043754	0/0394	9/95109018
CO	0/017034	0/0154	9/59257954
Ar	0/005678	0/00564	0/66924973
CS <sub>2</sub>	0/001503	0/00142	5/52228875
COS	0/001503	0/001495	0/53226879
N <sub>2</sub>	0/482632	0/48	0/54534303

پس از شبیه‌سازی جریان در فلوئنت، استخراج نتایج جهت بررسی صحت شبیه‌سازی و محاسبه پارامترهای مورد نیاز و یا استخراج کانتورهای مختلف در بخش نتایج انجام می‌گیرد. در این بخش با تعریف صفحات، خطوط و نقاط مختلف و همچنین وجود توابع محاسباتی مختلف همچون انتگرال‌های روی سطح، انتگرال جرمی و ... می‌توان پارامترهای مختلفی چون دمای میانگین، کسر مولی محصولات احتراق و سایر پارامترهای مورد نیاز را محاسبه کرد. کانتور دما کوره واکنش در شکل 4 آورده شده است.



شکل 4. کانتور دمای کوره واکنش

مطابق شکل 4 همان طور که مشاهده می‌شود، بیشینه دما که در کوره واکنش اتفاق می‌افتد برابر با 1650 کلوین بوده و همان طور که انتظار می‌رود این بیشینه دما در محل تشکیل شعله اتفاق افتاده و شدت این افزایش رفته رفته تا انتهای کوره کاهش می‌یابد به طوری که در میانه‌های کوره، دمای احتراق به یک دمای پایدار می‌رسد و این روند تا انتها ادامه دارد.



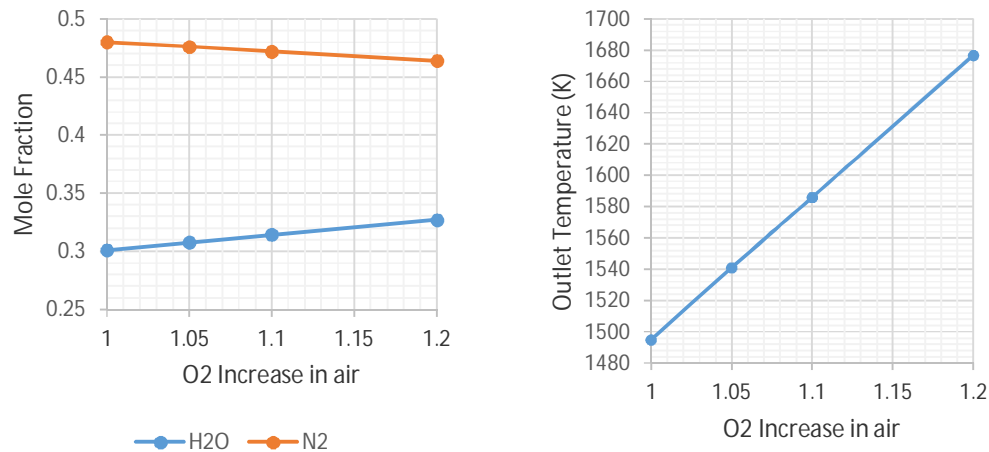
شکل 5. کانتور جزء مولی گوگرد

شکل 5 جزء مولی گوگرد را نشان می‌دهد. با توجه به اینکه گوگرد یکی از محصولات می‌باشد در طول راکتور تولید می‌شود و جزء مولی آن افزایش می‌یابد. پیداست که تولید آن تا نزدیک به انتهای راکتور ادامه می‌یابد.

### بررسی افزایش غلظت اکسیژن در هوای ورودی

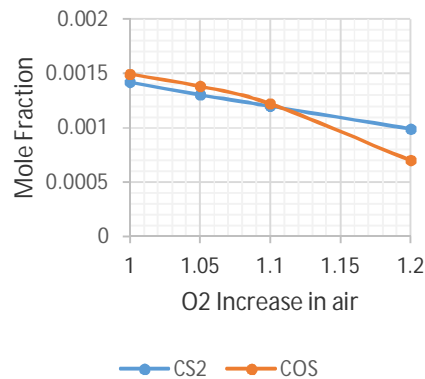
تاثیر افزایش نسبت مولی اکسیژن در هوای ورودی بر مشخصه‌های خروجی کوره واکنش در شکل 6 نشان داده شده است. همان طور که در این شکل مشاهده می‌شود، این افزایش تاثیر مثبت بر همه مشخصه‌های احتراقی داشته است. به طوری که به ازای 20 درصد افزایش نسبت مولی اکسیژن، دمای احتراق  $181/8$  درجه سانتی‌گراد افزایش یافته، به عبارت دیگر به ازای یک درصد افزایش نسبت مولی اکسیژن دمای خروجی  $9/09$  افزایش می‌یابد. جزء مولی کربونیل سولفید به ازای افزایش 20 درصدی نسبت مولی اکسیژن کاهش  $53/18$  درصدی داشته که این کاهش برای

جزء مولی کربن دی سولفید برابر با  $33/78$  درصد می باشد. این فرآیند بهینه سازی بر جزء مولی گوگرد نیز تاثیر مثبتی داشته است به طوری که به ازای افزایش 20 درصدی نسبت مولی اکسیژن، جزء مولی گوگرد افزایش  $11/39$  درصدی را نتیجه می دهد، به عبارت دیگر به ازای هر یک درصد افزایش نسبت مولی اکسیژن، جزء مولی گوگرد در خروجی حدود  $0/6$  درصد افزایش می یابد که خود امری مثبت تلقی می شود. به ازای افزایش 5 درصدی نسبت مولی اکسیژن دمای احتراق کوره واکنش، 46 درجه و به ازای افزایش 10 درصدی نسبت مولی اکسیژن، دمای کوره واکنش 91 درجه افزایش می یابد.



الف) تاثیر افزایش نسبت مولی اکسیژن در هوا بر دمای (ب) تاثیر افزایش نسبت مولی اکسیژن در هوا بر جزء

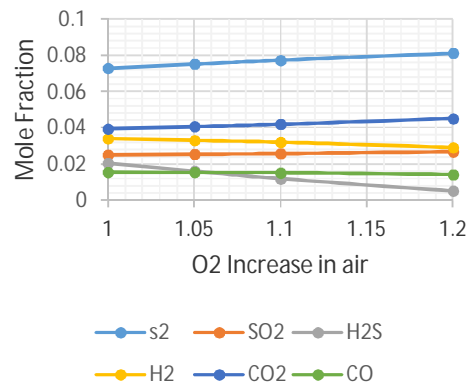
مولی محصولات



ث) تاثیر افزایش نسبت مولی اکسیژن در هوا بر جزء

مولی محصولات

خروجی راکتور



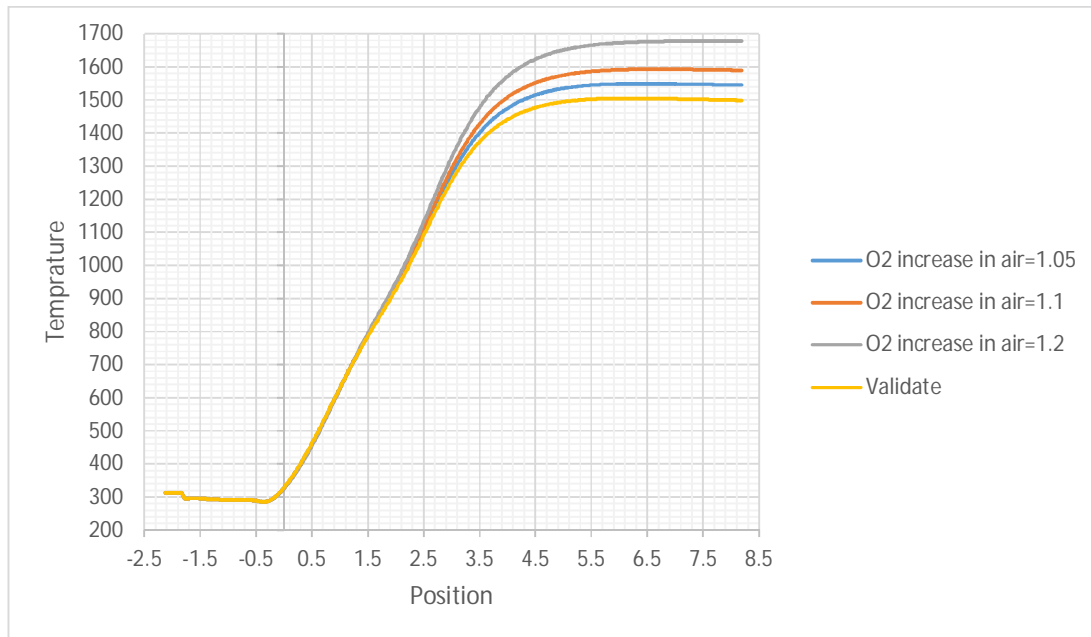
ت) تاثیر افزایش نسبت مولی اکسیژن در هوا بر جزء

مولی محصولات

شکل 6. تاثیر افزایش نسبت مولی اکسیژن در هوای ورودی بر دمای احتراق و جزء مولی اجزاء

در شکل 7 همان طور که مشاهده می شود، نمودارهای دما برای حالت های مختلف بهینه سازی در طول کوره بر روی محور تقارن رسم شده اند. میزان اختلاف نمودارها با هم تاثیر مراحل بهینه سازی را نشان می دهد. به این صورت که

در حالت بهینه‌سازی اول زمانی که نسبت مولی اکسیژن 5 درصد افزایش می‌یابد، در خروجی افزایش دمای 46 درجه‌ای مشاهده شده، که این مقدار افزایش دما در خروجی برای بهینه‌سازی مرحله دوم که نسبت مولی اکسیژن 10 درصد افزایش می‌یابد، تقریباً برابر با 91 درجه نسبت به حالت اولیه بوده، و در بهینه‌سازی مرحله سوم که میزان افزایش نسبت مولی اکسیژن 20 درصد بوده، میزان افزایش دما برابر با 179 درجه نسبت به حالت اولیه می‌باشد.



شکل 7. تاثیر افزایش نسبت مولی اکسیژن بر دمای احتراق در طول کوره واکنش

### نتیجه‌گیری و جمع‌بندی

افزایش غلظت اکسیژن تاثیر مثبت بر همه مشخصه‌های احتراقی داشته است. به طوری که به ازای 20 درصد افزایش نسبت مولی اکسیژن، دمای احتراق  $181/8$  درجه سانتی‌گراد افزایش یافته، به عبارت دیگر به ازای یک درصد افزایش نسبت مولی اکسیژن، دمای خروجی  $9/09$  درجه افزایش می‌یابد. جزء مولی کربونیل سولفید کاهش  $53/18$  درصدی داشته که این کاهش برای جزء مولی کربن دی سولفید برابر با  $33/78$  درصد می‌باشد. این فرآیند بهینه‌سازی بر جزء مولی گوگرد نیز تاثیر مثبتی داشته است به طوری که به ازای افزایش 20 درصدی نسبت مولی اکسیژن، جزء مولی گوگرد افزایش  $11/39$  درصدی را نتیجه می‌دهد. به عبارت دیگر به ازای هر یک درصد افزایش نسبت مولی اکسیژن، جزء مولی گوگرد در خروجی حدود  $0/6$  درصد افزایش می‌یابد که خود امری مثبت تلقی می‌شود.

مزایای این روش عبارتند از عدم تغییرات عمده در فرآیند، کاهش هوای مورد نیاز، افزایش ظرفیت واحد، دامنه گسترده کاربرد، داشتن شعله پایدارتر در کوره واکنش.

معایب این روش عبارتند از: هزینه اولیه جهت تهیه مواردی همانند (تغییر برنرها در صورت نیاز، تغییر سیستم کنترل جریان هوا، سیستم تولید اکسیژن یا خارج‌سازی نیتروژن) و هزینه جاری اکسیژن.

- [1] Bishtawi, R.E., Haimour, N., Claus Recycles with Double Combustion Process. *Fuel Processing Tech* 86, 2004, pp. 245-260.
- [2] Zarenezhad, B., An Investigation on the most Important Influencing Parameters Regarding the 3. Selection of the Proper Catalysts for Claus SRU Converts. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, Vol. 15, 2009, pp. 143-147.
- [3] Polasek, J., Bullin, J., Effect of Sulphur Recovery Requirements on Optimization of Integrated Sweetening, Sulphur Recovery, and Tail gas Clean up Units. *Proceedings of the SeventySecond GPA Annual Convention*, Tulsa, Gas Processors, 1993, pp. 170-174.
- [4] Blevins, S.K., *Proceeding of the Gas Conditioning Conference*, Norman, Oklahoma, 1993.
- [5] Asadi S., Pakizeh M., Pourafshari chenar M., An investigation of reaction furnace temperatures and sulfur recovery. *Front Chem Sci Eng* 5, 2011, pp. 362-371.
- [6] Boussetta N., Lanoiselle J.L., Bedel-Cloutour C., Vorobier E., Extraction of Soluble Matter From Grape Pomace by High Voltage Electrical Discharges for Polyphenol Recovery: Effect of Sulphur Dioxide and Thermal Treatments". *J Food Eng* 95, 2009, pp. 192-198.
- [7] Zarenezhad, B., Hosseinpour, N., Evaluation of Different Alternatives for Increasing the Reaction Furnace Temperature of Claus SRU by Chemical Equilibrium Calculations. *Applied Thermal Engineering*, Vol. 28, 2008, pp. 738-744.
- [8] Monney, W.D., Svrcek, W.Y., Behie, L.A., Modeling the Modified Claus Process Reaction Furnace and the Implication on Plant Design and Recovery. *Can. J. Chem Eng.*, Vol. 71, 1993, pp. 711-724.
- [9] Nasato, L.V., Karan, K., Mehrotra, A.K., Behie, L.A., Modeling Reaction Quench Times in the Waste Heat Boiler of a Claus Plant. *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 33, 1994, pp. 7-13.
- [10] Zarenezhad, B., Hosseinpour, N., Evaluation of Different Alternatives for Increasing the Reaction Furnace Temperature of Claus SRU by Chemical Equilibrium Calculations. *Applied Thermal Engineering*, Vol. 28, 2008, pp. 738-744.
- [11] Asadi, S., Hamed Mosavian, M.T., Ahmadpour, A., Effect of O<sub>2</sub> Concentration on the Reaction Furnace Temperature and Sulfur Recovery Using a TSWEET® Process Simulator. *J Chem Eng Process Technol*, 2013, pp. 3-4.
- [12] Lefebvre, A.H., Ballal, D.R., *Gas Turbine Combustion*, 3<sup>rd</sup> Ed, CRC Press, 1999.
- [13] اطلاعات مربوط به کوره واکنش واحد بازیافت کلاوس، موجود در اسناد پالایشگاه نفت آبادان.