



Research Article



DOI: 10.22034/farayandno.2024.2026377.1957



This journal is an open access journal licensed under an Attribution-Non Commercial 4.0 International Licenses (CC BY-NC 4.0).

Developing a Modeling-Based Approach to Design a Riser Reactor in the Fluid Catalytic Cracking (FCC) Process

Sina Maghsoudy¹, Mansoureh Yavari², Sara Tarighi², Sajjad Habibzadeh^{3*}

¹ Ph. D. Student of Chemical Engineering, Department of Chemical Engineering, Amirkabir University of Technology (Tehran Polytechnic), Tehran, Iran

² Associate Professor of Inorganic Chemistry, Faculty of Petrochemicals, Iran Polymer and Petrochemical Institute, Tehran, Iran

³ Assistant Professor of Chemical Engineering, Department of Chemical Engineering, Amirkabir University of Technology (Tehran Polytechnic), Tehran, Iran

Received: 12 Apr 2024 Accepted: 17 Aug 2024

Abstract

The fluid catalytic cracking (FCC) process is a cost-effective and reliable route to convert heavy oil fractions into valuable and light products. The riser reactors are commonly commercialized to perform this process. In this study, using a novel modeling-based approach, the design of the FCC riser reactor system is presented based on the gas oil feed with 24.1 kg s^{-1} mass flow rate. Subsequently, the performance of the designed reactor is examined under various operating conditions. For this purpose, an algorithm is proposed as the design procedure. Initially, the numerical model of the riser reactor is developed and then validated using experimental data including product distribution and outlet temperature. The presented numerical model matches the experimental data of an industrial unit with an average error of 7.52%. Based on the proposed design, the gas oil conversion is 94.32% and the mass fractions of products including diesel, gasoline, LPG, dry gas, and coke are 21.66%, 49.82%, 12.55%, 4.35%, and 5.94%, respectively. The process controllability to operating conditions is also determined based on the sensitivity analysis so that the catalyst-to-oil ratio (COR), feed flow rate, feed temperature, and catalyst temperature can be adjusted to achieve a desirable product distribution.

Keyword: FCC Process, Fluidized Bed, Riser Reactor, Lumped Model, Modeling and Simulation.

* sajjad.habibzadeh@aut.ac.ir

Please Cite This Article Using:

Maghsoudy, S., Yavari, M., Tarighi, S., Habibzadeh, S., "Developing a Modeling-Based Approach to Design a Riser Reactor in the Fluid Catalytic Cracking (FCC) Process", Journal of Farayandno – Vol. 19 – No. 86, pp. 5-26, In Persian, (2024).



DOI: 10.22034/farayandno.2024.2026377.1957



This journal is an open access journal licensed under an Attribution-Non Commercial 4.0 International Licenses (CC BY-NC 4.0).

توسعه یک رویکرد مبتنی بر مدل سازی به منظور طراحی رآکتور بالارونده در فرآیند شکست کاتالیستی بستر سیال (FCC)

سینا مقصودی¹، منصوره یآوری²، سارا طریقی²، سجاد حبیبزاده^{3*}

¹ دانشجوی دکتری مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، ایران

² دانشیار شیمی معدنی، پژوهشگاه پلیمر و پتروشیمی ایران، تهران، ایران

³ استادیار مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، ایران

دریافت: 1403/01/24 پذیرش: 1403/05/27

چکیده

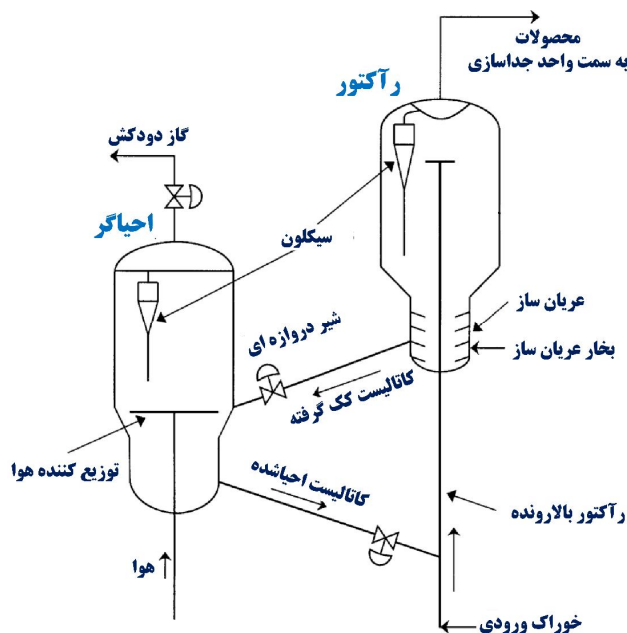
فرآیند شکست کاتالیستی بستر سیال (FCC) یک مسیر مقرون به صرفه و قابل اطمینان برای تبدیل برش های سنگین نفتی به محصولات سبک و با ارزش است. رآکتورهای بالارونده به منظور انجام این فرآیند به طور گسترده تجاری سازی شده اند. در این مطالعه، بر اساس یک رویکرد مبتنی بر مدل سازی، طراحی یک رآکتور بالارونده واحد FCC بر اساس خوراک ورودی نفت گاز با دبی جرمی $24/1 \text{ kg s}^{-1}$ ارائه شده است. به دنبال آن، عملکرد رآکتور طراحی شده در شرایط عملیاتی مختلف مورد بررسی قرار گرفته است. به این منظور، الگوریتمی به عنوان رویه طراحی پیشنهاد شده است. در ابتدا مدل عددی حاکم بر رآکتور توسعه داده شده و سپس با بهره گیری از داده های تجربی شامل توزیع محصولات و دمای خروجی اعتبارسنجی شده است. مدل عددی ارائه شده با متوسط خطای $7/52\%$ بر داده های تجربی یک واحد صنعتی منطبق شده است. بر اساس طراحی انجام شده، کسر تبدیل نفت گاز $94/32\%$ بوده و کسر وزنی محصولات شامل گازوئیل، بنزین، گاز مایع، گاز سبک و کک نیز به ترتیب برابر $21/66\%$ ، $49/82\%$ ، $12/55\%$ و $4/35\%$ می باشد. کنترل پذیری فرآیند نسبت به شرایط عملیاتی نیز بر اساس آنالیزهای حساسیت تعیین شده است به طوری که می توان نسبت کاتالیست به خوراک ورودی (COR)، نرخ خوراک ورودی، دمای خوراک ورودی و دمای کاتالیست ورودی را با هدف دستیابی به توزیع مناسبی از محصولات تنظیم نمود.

کلمات کلیدی: فرآیند FCC، بستر سیال، رآکتور بالارونده، مدل توده ای، مدل سازی و شبیه سازی

* sajjad.habibzadeh@aut.ac.ir

1- مقدمه

فرآیند شکست کاتالیستی بستر سیال یکی از مهم‌ترین فرآیندهای پالایشگاهی به شمار می‌آید که در آن خوراک نفت‌گاز¹ به محصولات با ارزش و سبک‌تری همچون گازوئیل²، بنزین³، گازمایع⁴ و گاز سبک⁵ تبدیل می‌گردد [1]. در این فرایند، خوراک ورودی در حضور کاتالیست‌های اسیدی آلومینا-سیلیکا به محصولات واکنش تجزیه می‌شود [1]. تکامل فناوری واحدهای شکست کاتالیستی بستر سیال به دلیل اهمیت این واحدها در اقتصاد جهانی پالایشگاه‌ها حائز اهمیت است. از این رو به دنبال غلبه بر مشکلات مربوط به پیچیدگی واکنش‌ها، پیشرفت‌های قابل توجهی در جنبه‌های اساسی مانند مکانیزم شکست، مدل‌سازی سینتیکی شکست و غیرفعال شدن کاتالیست صورت گرفته است [2]–[6]. از سوی دیگر، به دلیل نیاز به افزایش کیفیت محصولات، بهبودهای دائمی نیز در عملکرد این واحدها مورد نظر است [7]، [8]. در طراحی بسترهای دوگانه این فرآیند، بخار آب کاتالیست‌ها را از بستر راکتور به نقطه تزریق خوراک جابجا می‌کند. خوراک به شکل قطرات مایع به همراه بخار اتمایزکننده وارد می‌شود و در تماس با کاتالیست داغ قرار می‌گیرد و به سرعت تبخیر می‌شود. در حین تماس خوراک با پودر کاتالیست، خوراک شکسته شده و به هیدروکربن‌های سبک‌تر (گازوئیل، بنزین، گازمایع و گازهای سبک) و کک تبدیل می‌شود. در طی این فرآیند، کک تولید شده بر روی سطح کاتالیست رسوب می‌کند. کاتالیست کک گرفته از راکتور خارج شده و وارد احیاگر می‌شود. کک تشکیل شده بر روی سطح کاتالیست درون احیاگر و در محیط احتراق سوزانده می‌شود. پس از آن کاتالیست احیاشده گرم، مجدداً به پایه راکتور باز می‌گردد [9]. شمای کلی این فرآیند در شکل 1 نشان داده شده است.



شکل 1- شمای کلی فرآیند شکست کاتالیستی بستر سیال [9]

¹ Gas oil

² Diesel

³ Gasoline

⁴ LPG

⁵ Dry gas

درک فرآیند شکست کاتالیستی، بهبود عملکرد کاتالیست و طراحی بسترهای سیال واکنشی با کمک گرفتن از مطالعات سینتیکی تسهیل خواهد شد [10]، [15]. گیتس و همکاران [16] تلاش نمودند تا واکنش‌های کاتالیستی مهم این فرآیند را شناسایی نمایند اما از آنجایی که خوراک ورودی متشکل از هزاران مولکول هیدروکربنی است، شبکه واکنش میان این مولکول‌ها در این شرایط پیچیده، شامل صدها میلیون مرحله است [17]، [18]. از این رو تعیین تعداد مسیرهای واکنش و ثوابت سینتیکی آن‌ها عملاً غیرممکن خواهد بود. به همین دلیل استفاده از روش سینتیک توده‌های گسسته در مطالعات مربوط به این فرآیند پیشنهاد شده است [19]، [20]. در این روش مولکول‌ها در قطعات مختلفی به نام "شبه‌توده" جمع می‌شوند به طوری که واکنش‌های شیمیایی بین این توده‌ها به انجام می‌رسد [19]، [21]. بر طبق این روش، توده‌ها معمولاً خوراک و محصولات نهایی شکست در نظر گرفته می‌شوند. ویکمن و نیس [22] اولین مدل توده‌ای فرآیند FCC را ارائه نمودند. خوراک و محصولات فرآیند در این مدل در سه توده (1) خوراک ورودی نفت‌گاز، (2) بنزین و (3) مجموع گاز سبک و کک دسته‌بندی شده بود. در این مطالعه، مدل سه توده‌ای توسعه داده شده در یک مدل پیش‌بینی سینتیکی برای رآکتور بالارونده قرار گرفت و ارزیابی پارامترهای سینتیکی مدل با استفاده از داده‌های تجربی به انجام رسید. این مدل بازده تولید بنزین را به خوبی پیش‌بینی نمود. با این حال، قادر به پیش‌بینی بازده کک به عنوان یک مؤلفه متمایز نبود. پیش‌بینی بازده کک در فرآیند شکست کاتالیستی از اهمیت بالایی برخوردار است. کک تولیدی از یک سو با نشستن بر سطح کاتالیست منجر به غیرفعال شدن آن می‌شود و از سوی دیگر احتراق آن به عنوان یک منبع کربنی درون احیاکننده می‌تواند انرژی مورد نیاز برای واکنش‌های گرماگیر شکست درون رآکتور را تامین نماید. از این رو وین و همکاران [23] و لی و همکاران [24] در دو پژوهش متمایز مدل‌های سینتیکی چهار توده‌ای را توسعه دادند که در آن‌ها محصول کک به عنوان یک توده جداگانه در نظر گرفته شده بود. این مدل‌های سینتیکی به دلیل سادگی فرمولاسیون و حل معادلات جرم و انرژی همچنان مفید بوده و به عنوان مبنای توسعه بسیاری از مدل‌های سینتیکی دیگر قرار گرفته‌اند. با مبنا قرار دادن این مدل‌ها و افزایش تعداد توده‌ها می‌توان دقت مدل‌های سینتیکی را بهبود بخشید و مدل‌های سینتیکی جدیدتری را ارائه نمود. تلاش‌های انجام شده در این جهت منجر به توسعه مدل‌های سینتیکی پنج توده‌ای [25]، [26]، شش توده‌ای [5]، [27]، [28]، هشت توده‌ای [29]، ده توده‌ای [32]، [30]، یازده توده‌ای [33]، دوازده توده‌ای [34]، [35]، سیزده توده‌ای [36] و نوزده توده‌ای [37] گردید.

مطالعات سینتیکی در کنار شبیه‌سازی‌های عملکردی رآکتور FCC، می‌توانند راهکارهای جذابی را در خصوص بهبود کارایی سیستم ارائه نمایند. در این راستا، شبیه‌سازی این فرآیند نیازمند استفاده از مدل‌هایی است که قادر باشند پدیده‌های هیدرودینامیکی را در کنار پدیده‌های مربوط به واکنش‌های شیمیایی، انتقال حرارت و انتقال جرم مورد بررسی قرار دهند. در سالیان اخیر، پژوهش‌های متعددی بر توسعه مدل‌های ریاضی و شبیه‌سازی‌های عددی به منظور بهبود ساختار و عملکرد رآکتورهای FCC متمرکز شده‌اند. از آن جمله، وربو و همکاران [38] با بهره‌گیری از روش‌های دینامیک سیالات محاسباتی توانستند توزیع فازها و واکنش‌های شیمیایی در یک رآکتور FCC را با دقت بالاتری پیش‌بینی نمایند. ژونگ و همکاران [39] نیز به بررسی شبیه‌سازی جریان چندفازی و تاثیر پارامترهای مختلف بر عملکرد رآکتور واحد FCC پرداختند. از سوی دیگر، دو و همکاران [40] با استفاده از مدل مقیاس ذره توانستند اثرات تعاملات بین ذرات کاتالیست و گازهای واکنشی را به تصویر بکشند. مطالعه‌ی نرگسی و همکاران [41] نیز بر اهمیت

توزیع انتقال حرارت و انتقال جرم در بهبود کارایی رآکتورهای شکست کاتالیستی تاکید نمود و نشان داد که مدل سازی دقیق این پارامترها می تواند به بهینه سازی شرایط عملیاتی کمک کند. در زمینه انتقال حرارت و جرم درون رآکتور، پژوهش های دیگری نیز بر اهمیت این پارامترها در بهبود کارایی رآکتورهای FCC تاکید کرده اند. به عنوان مثال، پژوهش چن و همکاران [42] نشان داد که بهینه سازی پروفایل دما در طول رآکتور می تواند به طور قابل توجهی عملکرد فرآیند را بهبود بخشد.

با وجودی که مدل های سینتیکی توده ای و شبیه سازی ها عملکردی فرآیند FCC به خوبی توسعه یافته اند اما کاربرد این مدل ها در توسعه طراحی رآکتورهای بالارونده و آنالیز حساسیت پارامترهای عملیاتی فرآیند با هدف بهینه کردن این طراحی کمتر مورد توجه قرار گرفته است. در این پژوهش، طراحی رآکتور بالارونده فرآیند FCC با استفاده از رویکردی مبتنی بر مدل سازی انجام شده است. از این رو در ابتدا مدل عددی حاکم بر رآکتور توسعه یافته است. به دنبال آن، الگوریتمی به عنوان رویه طراحی برای نخستین بار ارائه شده است. بر اساس مدل ریاضی و الگوریتم طراحی، نتایج حاصل از شبیه سازی های عددی در مقایسه با داده های تجربی در دسترس از یک واحد صنعتی اعتبارسنجی شده است. در پایان نیز آنالیز حساسیت بر پارامترهای عملیاتی سیستم همچون نسبت کاتالیست به خوراک ورودی (COR)، نرخ خوراک ورودی، دمای خوراک ورودی و دمای کاتالیست ورودی مورد بحث و بررسی قرار گرفته است.

2- مواد و روش ها

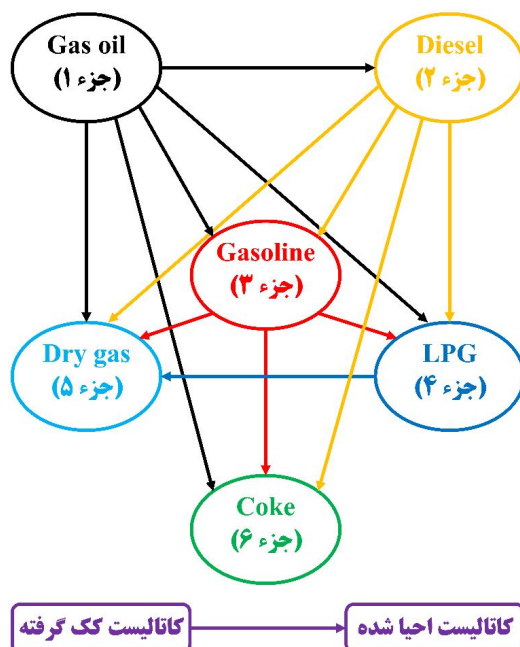
2-1- مدل ریاضی

به منظور توسعه مدل ریاضی حاکم و ارائه طراحی رآکتور مد نظر در فرآیند شکست شکست کاتالیستی بستر سیال، فرضیات زیر در این پژوهش در نظر گرفته شده است.

- مدل جریان قالبی⁶ تک بعدی در رآکتور بالارونده بدون پراکندگی در جهات محوری و شعاعی
- عایق بودن دیواره های رآکتور
- ثابت بودن ویسکوزیته و ظرفیت گرمایی تمامی اجزا
- ناچیز بودن میزان جذب و پخش درون ذرات کاتالیست
- اثر ناچیز میزان کک نشسته بر سطح کاتالیست بر هیدرودینامیک جریان
- برقراری تعادل دمایی بین کاتالیست و گاز در نواحی مختلف درون رآکتور
- تبخیر آبی خوراک در ورودی در پی تماس با کاتالیست
- انجام تمامی واکنش های شکست کاتالیستی درون رآکتور بالارونده.

در این پژوهش یک مدل سینتیکی⁶ جزئی به منظور شبیه سازی رفتار سینتیکی سیستم در نظر گرفته شده است. این مدل که برای نخستین بار توسط دو و همکاران [18] ارائه شد، در بسیاری از مطالعات سینتیکی مربوط به فرآیند FCC مورد استفاده و بررسی قرار گرفته است. اجزای این مدل سینتیکی را می توان در شش دسته: (1) Gas oil (2) Diesel (3) Gasoline (4) LPG (5) Dry gas و (6) Coke دسته بندی نمود. شماتیک این مدل سینتیکی در شکل 2 نشان داده شده است.

⁶ Plug flow



شکل 2- شماتیک مدل سینتیکی 6 جزئی در نظر گرفته شده در پژوهش حاضر [5], [18], [43]

با در نظر گرفتن معادلات بقای جرم، تغییرات کسر وزنی اجزا در طول رآکتور را می‌توان بر اساس روابط 1 تا 6 بیان نمود. معادلات موازنه جرم با نوشتن اصل بقای جرم در یک المان دیفرانسیلی به ارتفاع dz حاوی ذرات کاتالیست حاصل شده است. در نوشتن اصل بقای جرم فرض شده است که واکنش‌های انجام شده درون این المان دیفرانسیلی نسبت به نفت‌گاز از مرتبه دوم و نسبت به سایر ترکیبات از مرتبه اول هستند. در نهایت، معادلات حاصل توزیع کسر وزنی تمامی اجزا در طول بستر کاتالیستی را نشان خواهند داد. [15], [44].

$$\frac{dy_1}{dz} = \frac{\phi_R A_R (1-\varepsilon) \rho_{cat}}{F_{gR}} \left[-(K_{12} + K_{13} + K_{14} + K_{15} + K_{16}) y_1^2 \right] \quad (1)$$

$$\frac{dy_2}{dz} = \frac{\phi_R A_R (1-\varepsilon) \rho_{cat}}{F_{gR}} \left[(K_{12}) y_1^2 - (K_{23} + K_{24} + K_{25} + K_{26}) y_2 \right] \quad (2)$$

$$\frac{dy_3}{dz} = \frac{\phi_R A_R (1-\varepsilon) \rho_{cat}}{F_{gR}} \left[(K_{13}) y_1^2 + (K_{23}) y_2 - (K_{34} + K_{35} + K_{36}) y_3 \right] \quad (3)$$

$$\frac{dy_4}{dz} = \frac{\phi_R A_R (1-\varepsilon) \rho_{cat}}{F_{gR}} \left[(K_{14}) y_1^2 + (K_{24}) y_2 + (K_{34}) y_3 - (K_{45}) y_4 \right] \quad (4)$$

$$\frac{dy_5}{dz} = \frac{\phi_R A_R (1-\varepsilon) \rho_{cat}}{F_{gR}} \left[(K_{15}) y_1^2 + (K_{25}) y_2 + (K_{35}) y_3 + (K_{45}) y_4 \right] \quad (5)$$

$$\frac{dy_6}{dz} = \frac{\phi_R A_R (1-\varepsilon) \rho_{cat}}{F_{gR}} \left[(K_{16}) y_1^2 + (K_{26}) y_2 + (K_{36}) y_3 \right] \quad (6)$$

در این روابط y کسر وزنی اجزا، z ارتفاع رآکتور، ϕ_R تابع غیر فعال شدن کاتالیست، A_R سطح مقطع رآکتور، ε تخلخل بستر، ρ_{cat} دانسیته کاتالیست، F_{gR} دبی جرمی گاز ورودی و K ثابت سینتیکی واکنش می‌باشد.

شرایط مرزی این دستگاه معادلات دیفراسیل را نیز می‌توان با در نظر داشتن کسر وزنی اجزا در ورودی رآکتور استخراج نمود. جریان ورودی رآکتور حاوی خوراک نفت‌گاز می‌باشد. بنابراین به عنوان شرایط مرزی، کسر وزنی نفت‌گاز در ورودی برابر یک و کسر وزنی سایر اجزا برابر صفر در نظر گرفته می‌شود. بر اساس معادلات بقای انرژی، تغییرات دما در طول رآکتور را نیز می‌توان بر طبق رابطه 7 بیان نمود [15], [44].

$$\frac{dT}{dz} = - \frac{\phi_R A_R (1 - \varepsilon) \rho_{cat}}{F_{gR} C_{p_{gR}} + F_{cat} C_{p_{cat}}} \left[\begin{aligned} &(K_{12} \Delta H_{12} + K_{13} \Delta H_{13} + K_{14} \Delta H_{14} + K_{15} \Delta H_{15} + K_{16} \Delta H_{16}) y_1^2 + \\ &(K_{23} \Delta H_{23} + K_{24} \Delta H_{24} + K_{25} \Delta H_{25} + K_{26} \Delta H_{26}) y_2 + \\ &(K_{34} \Delta H_{34} + K_{35} \Delta H_{35} + K_{36} \Delta H_{36}) y_3 + (K_{45} \Delta H_{45}) y_4 \end{aligned} \right] \quad (7)$$

در این رابطه T دما، z ارتفاع رآکتور، ϕ_R تابع غیر فعال شدن کاتالیست، A_R سطح مقطع رآکتور، ε تخلخل بستر، ρ_{cat} دانسیته کاتالیست، F_{gR} دبی جرمی گاز ورودی، $C_{p_{gR}}$ ظرفیت گرمایی ویژه گاز ورودی، F_{cat} دبی جرمی کاتالیست، $C_{p_{cat}}$ ظرفیت گرمایی ویژه کاتالیست، K ثابت سینتیکی واکنش و ΔH تغییر آنتالپی واکنش می‌باشد. مقدار دما در ورودی رآکتور (T_0) را نیز می‌توان با موازنه انرژی بر روی جریان‌های ورودی به رآکتور بر طبق رابطه 8 تعیین کرد [15], [44].

$$F_{cat} C_{p_{cat}} (T_0 - T_{cat}) + F_{go} C_{p_{go}}^L (T_{vap} - T_{go}) + F_{go} C_{p_{go}}^V (T_0 - T_{vap}) + F_{go} \Delta H_{vap} + F_{steam} C_{p_{steam}} (T_0 - T_{steam}) = 0 \quad (8)$$

در این رابطه F دبی جرمی، C_p ظرفیت گرمایی ویژه، T دما و ΔH تغییر آنتالپی می‌باشد. تابع غیرفعال شدن کاتالیست می‌تواند بر اساس زمان ماند کاتالیست [44] و یا درصد کک کاتالیست [37] بیان شود. معادلات متناظر به ترتیب در روابط 9 و 10 نشان داده شده‌اند.

$$\phi_R = \exp(-K_d t_c) \quad (9)$$

$$\phi_R = \frac{23.28 \times (1.59 - w_c)}{1.59 \times (22.28 + \exp(2.18 \times w_c))} \quad (10)$$

در این روابط ϕ_R تابع غیر فعال شدن کاتالیست، K_d ثابت سینتیکی غیرفعال شدن، t_c زمان ماند کاتالیست و w_c درصد کک کاتالیست می‌باشد.

با ترکیب روابط 9 و 10 می‌توان زمان ماند کاتالیست را به صورت تابعی از درصد کک کاتالیست بیان نمود. این موضوع در رابطه 11 نشان داده شده است. از سوی دیگر مطابق رابطه 12 زمان ماند کاتالیست خود مجموعی از زمان ماند ظاهری کاتالیست ورودی به رآکتور و مدت زمان حضور کاتالیست درون رآکتور است. زمان ماند ظاهری کاتالیست ورودی را نیز می‌توان با جایگذاری درصد کک کاتالیست ورودی در رابطه 11 محاسبه نمود [45].

$$t_c = - \frac{1}{K_d} \ln \left(\frac{23.28 \times (1.59 - w_c)}{1.59 \times (22.28 + \exp(2.18 \times w_c))} \right) \quad (11)$$

$$t_c = t_{c,0} + \frac{H_R}{u_{cat}} \quad (12)$$

در این روابط t_c زمان ماند کاتالیست، K_d ثابت سینتیکی غیرفعال شدن، w_c درصد کک کاتالیست، $t_{c,0}$ زمان ماند ظاهری کاتالیست ورودی، H_R ارتفاع رآکتور و u_{cat} سرعت کاتالیست می‌باشد.

بر اساس محاسبات هیدرودینامیکی می‌توان سرعت کاتالیست موجود در رابطه 12 را محاسبه نمود. به این منظور در ابتدا سرعت حد ذرات کاتالیست بر طبق رابطه 13 محاسبه می‌شود [9]، [46].

$$u_t = \frac{g}{18 \times \mu_{gR}} \times (\rho_{cat} - \rho_{gR}) \times D_{cat}^2 \quad (13)$$

در این رابطه u_t سرعت حد، g ثابت گرانش، μ_{gR} ویسکوزیته گاز ورودی، ρ_{cat} دانسیته کاتالیست، ρ_{gR} دانسیته گاز ورودی و D_{cat} قطر ذرات کاتالیست می‌باشد.

مطابق تعریف، فاکتور لغزش^۷ در رابطه 14 نشان داده شده است [25]، [47].

$$\psi = 1 + 5.6 \frac{(gD_R)^{0.5}}{u_0} + 0.47 \left(\frac{u_t}{(gD_R)^{0.5}} \right)^{0.47} \quad (14)$$

در این رابطه ψ فاکتور لغزش، g ثابت گرانش، D_R قطر رآکتور، ρ_{cat} دانسیته کاتالیست، u_0 سرعت گاز ورودی و u_t سرعت حد می‌باشد.

به کمک تعریف فاکتور لغزش ارائه شده در رابطه 14 می‌توان تخلخل بستر را بر طبق رابطه 15 محاسبه نمود [25]، [47].

$$\varepsilon = 1 - \frac{\psi G_{cat}}{\psi G_{cat} + u_0 \rho_{cat}} \quad (15)$$

در این رابطه ε تخلخل بستر، ψ فاکتور لغزش، G_{cat} شار جرمی کاتالیست و ρ_{cat} دانسیته کاتالیست می‌باشد. در نهایت می‌توان سرعت کاتالیست را مطابق رابطه 16 محاسبه نمود و زمان ماند کاتالیست را به کمک آن تعیین کرد [25]، [47].

$$u_{cat} = \frac{G_{cat}}{\rho_{cat} (1 - \varepsilon)} \quad (16)$$

در این رابطه u_{cat} سرعت کاتالیست، G_{cat} شار جرمی کاتالیست، ρ_{cat} دانسیته کاتالیست و ε تخلخل بستر می‌باشد. ثوابت سینتیکی مدل توسعه داده شده، بر طبق معادله آرنیوس از رابطه 17 محاسبه می‌شود [15]، [44]. مقادیر K_{i0} و E_i این مدل نیز در جدول 1 خلاصه شده است.

$$K_i = K_{i0} \left[\frac{-E_i}{RT} \right] \quad (17)$$

در این رابطه K_i ثابت سینتیکی واکنش، R ثابت جهانی گازها، T دما و K_{i0} و E_i نیز ثوابت معادله آرنیوس می‌باشند.

جدول 1- پارامترهای سینتیکی مدل توسعه داده شده

شماره	واکنش	K_{i0} (s ⁻¹) [25]، [18]	E_i (j mol ⁻¹) [25]، [18]	ΔH_i (j kg ⁻¹) [۱۵]
12	Gas oil → Diesel	601/7	59330	190709
13	Gas oil → Gasoline	219000	95000	128450
14	Gas oil → LPG	16/96	38050	209192
15	Gas oil → Dry gas	1869	176440	44543
16	Gas oil → Coke	28/91	177200	458345

⁷ Slip factor

513568	57500	240/46	Diesel → Gasoline	23
90894	141950	46/08	Diesel → LPG	24
204381	81780	1560	Diesel → Dry gas	25
305925	174400	27000	Diesel → Coke	26
225082	74220	40/39	Gasoline → LPG	34
19667	135340	1/6	Gasoline → Dry gas	35
117212	44260	1/22	Gasoline → Coke	36
17618	89270	78/98	LPG → Dry gas	45
-	61385/59	1230/9	Deactivation	-

مجموعه ثوابت معادلات و خواص فیزیکی اجزا در مدل توسعه داده شده نیز در جدول 2 ارائه شده است.

جدول 2- ثوابت معادلات و خواص فیزیکی اجزا در مدل توسعه داده شده

منبع	مقدار	علامت	واحد	پارامتر
[44]	190000	ΔH_{vap}	J kg^{-1}	آنتالپی تبخیر Gas oil
[44]	333	$MW_{Gas\ oil}$	g mol^{-1}	جرم مولکولی Gas oil
[15]	178/6	MW_{Diesel}	g mol^{-1}	جرم مولکولی Diesel
[44]	106/7	$MW_{Gasoline}$	g mol^{-1}	جرم مولکولی Gasoline
[15]	46/7	MW_{LPG}	g mol^{-1}	جرم مولکولی LPG
[44]	40	$MW_{Dry\ gas}$	g mol^{-1}	جرم مولکولی Dry gas
[44]	14/4	MW_{Coke}	g mol^{-1}	جرم مولکولی Coke
[44]	18	MW_{Steam}	g mol^{-1}	جرم مولکولی Steam
[47]	3300	$Cp^L_{Gas\ oil}$	$\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$	ظرفیت گرمایی ویژه Gas oil مایع
[47]	2670	$Cp^V_{Gas\ oil}$	$\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$	ظرفیت گرمایی ویژه Gas oil بخار
[48]	3300	Cp_{Diesel}	$\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$	ظرفیت گرمایی ویژه Diesel
[47]	3300	$Cp_{Gasoline}$	$\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$	ظرفیت گرمایی ویژه Gasoline
[48]	3300	Cp_{LPG}	$\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$	ظرفیت گرمایی ویژه LPG
[47]	3300	$Cp_{Dry\ gas}$	$\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$	ظرفیت گرمایی ویژه Dry gas
[47]	1087	Cp_{Coke}	$\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$	ظرفیت گرمایی ویژه Coke
[47]	1900	Cp_{Steam}	$\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$	ظرفیت گرمایی ویژه Steam
[1]	1087	Cp_{cat}	$\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$	ظرفیت گرمایی ویژه کاتالیست
[1]	85	D_{cat}	μm	قطر کاتالیست
[1]	1300	ρ_{cat}	kg m^{-3}	دانشیه کاتالیست

2-2- جزئیات حل

2-2-1- رویکرد شبیه‌سازی

رویکرد شبیه‌سازی باید به گونه‌ای انتخاب گردد تا طراحی و بررسی عملکرد رآکتور بالارونده فرآیند شکست کاتالیستی بستر سیال به عنوان هدف این پژوهش محقق گردد. به این منظور مدل عددی شرح داده شده در این پژوهش توسعه یافته است. در مدل توسعه یافته، به منظور حل دستگاه معادلات ODE حاکم از روش گسسته‌سازی رانج کوتاه مرتبه چهار با کمک گرفتن از بسته نرم‌افزاری MATLAB R2022b استفاده شده است. لازم به ذکر است که در مجموعه شبیه‌سازی‌های انجام‌شده، سخت افزار دارای CPU مدل Intel® Core™ i7-4510U و RAM با حافظه 16 GB مورد استفاده قرار گرفته است.

2-2-2- رویه طراحی

پارامترهای متنوع هیدرودینامیکی و سینتیکی بر عملکرد رآکتور بالارونده فرآیند FCC تاثیر می‌گذارند. از جمله این پارامترها می‌توان به نسبت کاتالیست به خوراک ورودی (COR)، محدوده کک عملیاتی کاتالیست، زمان ماند و نرخ گردش کاتالیست، مشخصات و شرایط خوراک ورودی، دمای رآکتور، ابعاد رآکتور و رژیم جریان اشاره نمود. گستردگی این پارامترها سبب می‌شود که دستیابی به طراحی بهینه سیستم نیازمند یک الگوریتم با حلقه‌های داخلی تکرار شونده باشد. به این منظور و در این پژوهش فلوجارت طراحی رآکتور بالارونده فرآیند FCC مطابق شکل 3 ارائه شده است. بر اساس این فلوجارت، در ابتدا نرخ خوراک ورودی به عنوان مشخصه‌ای از ابعاد واحد در نظر گرفته می‌شود. در ادامه، محدوده کک عملیاتی به عنوان شرط همگرایی لحاظ شده است. بر اساس اطلاعات در دسترس از واحدهای شکست کاتالیستی در حال کار، کاتالیست غیرفعال شده خروجی از رآکتور دارای درصد ککی مابین 0/5-1/5 و کاتالیست احیاشده برگشتی به رآکتور نیز دارای درصد ککی کمتر از 0/1 است [1]. بنابراین در گام دوم طراحی لازم است تا محدوده کک عملیاتی مطلوب در نظر گرفته شود. انتخاب این محدوده از این نظر حائز اهمیت است که در انتهای چرخه‌های داخلی تکرارشونده، درصد کک کاتالیست خروجی از رآکتور به عنوان شرط همگرایی طراحی در نظر گرفته می‌شود. در ادامه این فلوجارت طراحی، شرایط عملیاتی، ابعاد رآکتور و نسبت کاتالیست به خوراک ورودی (COR) تعیین شده و با اجرای مدل عددی توسعه یافته، شبیه‌سازی رآکتور به انجام می‌رسد. پس از آن لازم است تا صحت و دقت طراحی انجام شده اثبات گردد. به این منظور و در ابتدا رژیم سیالیت حاکم بر رآکتور مورد بررسی قرار می‌گیرد. بر اساس اطلاعات موجود از شرایط رآکتور واحد شکست کاتالیستی می‌توان گفت که کاتالیست این واحد دارای حداقل سرعت سیالیت⁸ $0/6 \text{ cm s}^{-1}$ و حداقل سرعت تشکیل حباب⁹ $0/9 \text{ cm s}^{-1}$ می‌باشد [1]. بنابراین در صورتی که سرعت گاز ورودی به رآکتور کمتر از $0/6 \text{ cm s}^{-1}$ باشد، بستر در حالت ثابت قرار گرفته و سیالیت لازم درون آن برقرار نخواهد شد. همچنین لازم است تا رآکتور این واحد به گونه‌ای طراحی گردد تا رژیم سیالیت حاکم بر آن در شرایط مغشوش¹⁰، سریع¹¹ و یا انتقال پنوماتیک¹² قرار گیرد. به طور کلی می‌توان گفت که

⁸ Minimum fluidization velocity

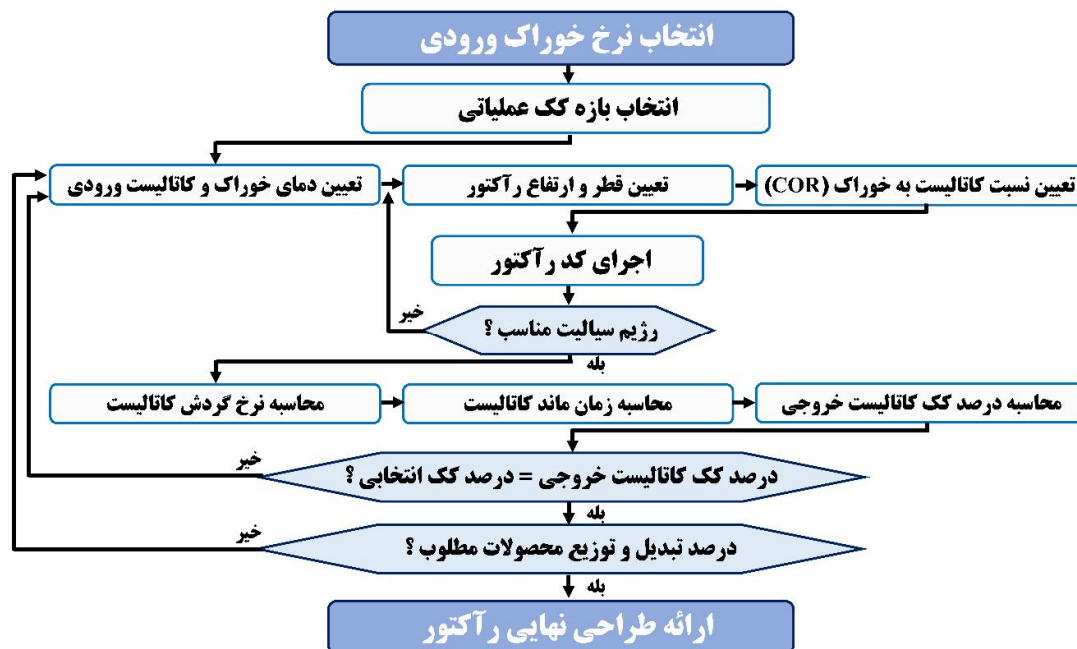
⁹ Minimum bubbling velocity

¹⁰ Turbulent fluidization

¹¹ Fast fluidization

¹² Dilute transportation

رژیم سیالیت سریع با محدوده سرعت گاز ورودی $6-17 \text{ m s}^{-1}$ به عنوان شرایط مطلوب طراحی رآکتور در این واحد پیشنهاد شده است [1]. بر اساس توضیحات ارائه شده و به منظور بررسی رژیم سیالیت در فلوچارت طراحی این پژوهش، سرعت گاز ورودی بر اساس دانسیته خوراک محاسبه شده و از این طریق رژیم سیالیت حاکم مورد بررسی قرار می‌گیرد. به دنبال برقراری رژیم سیالیت مناسب درون رآکتور می‌توان نرخ گردش کاتالیست و زمان ماند کاتالیست را با کمک گرفتن از روابط 12 و 16 محاسبه نمود. با انجام شبیه‌سازی، درصد کک کاتالیست غیرفعال شده خروجی از رآکتور مشخص شده است. در این مرحله این مقدار به عنوان شرط همگرایی با مقدار اولیه در نظر گرفته شده در گام دوم طراحی مقایسه می‌شود. در صورت عدم برابری مقادیر، لازم است تا حلقه‌های داخلی تا زمان همگرایی تکرار گردند. در صورت برابری این دو مقدار نیز، درصد تبدیل خوراک ورودی و نحوه توزیع محصولات به عنوان شرایط نهایی دستیابی به طراحی مورد نظر بررسی می‌شوند. پس از دستیابی به درصد تبدیل و توزیع مطلوب محصولات، ابعاد و طراحی رآکتور مشخص شده و طراحی نهایی آن ارائه می‌گردد.



شکل 3- فلوچارت طراحی رآکتور بالارونده فرآیند شکست کاتالیستی بستر سیال

3- نتایج و بحث

3-1- اعتبارسنجی مدل

نتایج تجربی حاصل از پژوهش جان و همکاران [15] با نتایج حاصل از شبیه‌سازی به منظور اعتبارسنجی مدل عددی مقایسه شده است. در این واحد صنعتی، خوراک ورودی نفت‌گاز با دبی جرمی $62/5 \text{ kg s}^{-1}$ و دمای 478 K وارد رآکتور بالارونده به قطر $1/36 \text{ m}$ و ارتفاع $47/1 \text{ m}$ شده است. نسبت کاتالیست به خوراک ورودی (COR) در این واحد برابر $6/405$ بوده که متناظر با نرخ گردش کاتالیست $400/32 \text{ kg s}^{-1}$ می‌باشد. کاتالیست احیا شده و ورودی به رآکتور نیز دارای درصد کک $0/1\%$ و دمای 905 K بوده است. به منظور اعتبارسنجی مدل عددی، کلیه شرایط شبیه‌سازی، هندسه و تنظیمات مطابق با شرایط ارائه شده این واحد صنعتی در نظر گرفته شده است. لازم به ذکر

است که با اختلاط جریان‌های گاز و کاتالیست هر یک با دمای 478 K و 905 K، دمای ورودی رآکتور برابر 763 K به دست خواهد آمد (رابطه 8). مقایسه نتایج حاصل از شبیه‌سازی با داده‌های تجربی این واحد صنعتی در جدول 3 ارائه شده است. همانطور که در جدول 3 مشاهده می‌شود، تطابق خوبی بین داده‌های تجربی و پیش‌بینی شده وجود دارد. به این ترتیب، مشاهده می‌شود که مدل عددی توسعه یافته در این پژوهش، با دقت خوبی رفتار واکنش شکست کاتالیستی را پیش‌بینی می‌کند. با خلاصه کردن اطلاعات جدول 3، می‌توان مشاهده کرد که اختلاف بین داده‌های تجربی و عددی بسیار پایین است. بیشترین انحراف در این نتایج تنها 13% و برای محصول گازوئیل می‌باشد. بنابراین می‌توان گفت که مدل عددی توسعه یافته دارای اعتبار بوده و می‌تواند با هدف طراحی و بررسی عملکرد رآکتور بالارونده فرآیند شکست کاتالیستی بستر سیال مورد استفاده قرار گیرد.

جدول 3- مقایسه نتایج حاصل از شبیه‌سازی با داده‌های تجربی در دسترس به منظور اعتبارسنجی مدل عددی

پارامترها							
درصد وزنی Gas oil (%)	درصد وزنی Diesel (%)	درصد وزنی Gasoline (%)	درصد وزنی LPG (%)	درصد وزنی Dry gas (%)	درصد وزنی Coke (%)	دمای گاز (K)	دمای کاتالیست (K)
5/29	21/05	46/37	15/00	4/41	7/88	732/96	732/96
4/78	18/57	47/31	15/18	4/83	8/91	773/20	773/20
10/67	13/35	1/99	1/19	8/70	11/56	5/20	5/20

شبیه‌سازی [15]

واحد صنعتی

درصد خطا (%)

2-3- معیارهای طراحی

دستیابی به مشخصات طراحی رآکتور بالارونده فرآیند FCC با استفاده از فلوچارت طراحی شکل 3 انجام شده است. بر اساس این فلوچارت، در این پژوهش طراحی رآکتور با خوراک ورودی نفت‌گاز با دبی جرمی $24/1 \text{ kg s}^{-1}$ ارائه شده است. بازه تغییرات 0/1-0/9 درصد کک کاتالیست، به عنوان ورودی طراحی در نظر گرفته شده است. با چندین مرحله شبیه‌سازی و انجام چرخه‌های تکرارشونده، قطر رآکتور برابر 82 cm، ارتفاع رآکتور برابر 31 m و نرخ گردش کاتالیست برابر $142/19 \text{ kg s}^{-1}$ حاصل شده است. این مقادیر در شرایط برقراری رژیم جریان سریع¹³، دمای نفت‌گاز ورودی 488 K، دمای کاتالیست ورودی 972 K، نسبت کاتالیست به خوراک ورودی (COR) 5/9 و سرعت گاز برابر $10/01 \text{ m s}^{-1}$ به دست آمده است. در این طراحی، کسر تبدیل نفت‌گاز 94/32% است و کسر وزنی گازوئیل، بنزین، گاز مایع، گاز سبک و کک در محصولات نیز به ترتیب برابر 21/66%، 49/82%، 12/55%، 4/35% و 5/94% می‌باشند. مشخصات کاملی از طراحی انجام شده در جدول 4 ارائه شده است. عملکرد رآکتور در شرایط طراحی شده نیز در ادامه مورد بررسی قرار گرفته است.

¹³ Fast fluidization

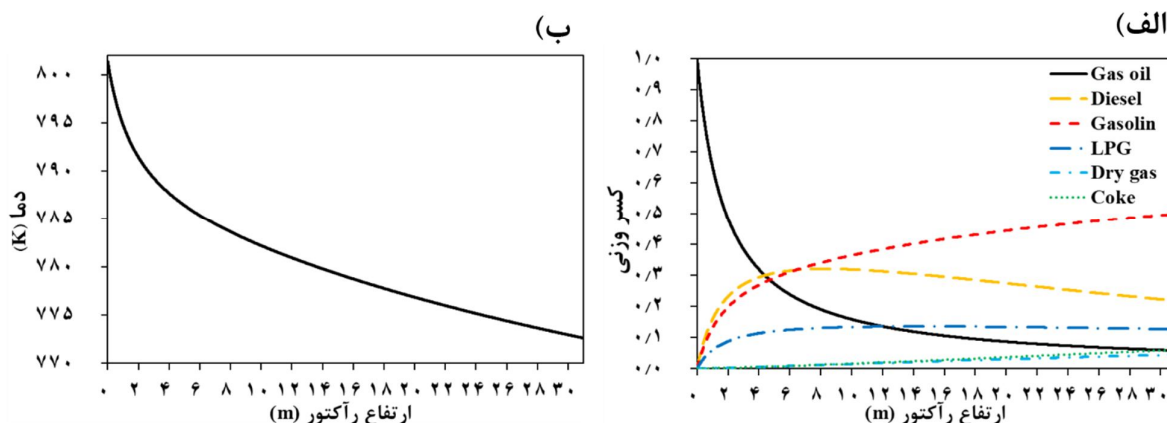
جدول 4- معیارهای طراحی رآکتور بالارونده فرآیند شکست کاتالیستی بستر سیال

مقدار	علامت	واحد	پارامتر	
24/1	F_{go}	$kg\ s^{-1}$	دبی جرمی gas oil	ورودی
0/1 – 0/9	W_C	%	محدوده کک کاتالیست	
0/82	D	m	قطر	
31	H	m	ارتفاع	
488	$T_{in, go}$	K	دمای gas oil ورودی	
972	$T_{in, cat}$	K	دمای کاتالیست ورودی	
772/62	T_{out}	K	دمای خروجی	
5/9	COR	-	نسبت کاتالیست به gas oil	
142/19	G_{cat}	$kg\ s^{-1}$	نرخ گردش کاتالیست	
94/59	ϵ	%	تخلخل عملیاتی بستر	
10/01	U_{gas}	$m\ s^{-1}$	سرعت گاز	نتایج
3/83	U_{cat}	$m\ s^{-1}$	سرعت کاتالیست	
3/10	Tr_{gas}	s	زمان ماند گاز	
8/10	Tr_{cat}	s	زمان ماند کاتالیست	
94/32	X_{go}	%	درصد تبدیل gas oil	
21/66	X_{diesel}	%	کسر جرمی diesel	
49/82	$X_{gasoline}$	%	کسر جرمی gasoline	
12/55	X_{LPG}	%	کسر جرمی LPG	
4/35	X_{DG}	%	کسر جرمی dry gas	
5/94	X_{coke}	%	کسر جرمی coke	

3-3- عملکرد رآکتور

شکل 4- الف تغییرات کسر جرمی خوراک ورودی و محصولات مختلف فرآیند را در طول رآکتور نشان می‌دهد. همانطور که مشخص است، کسر جرمی خوراک با افزایش ارتفاع رآکتور کاهش می‌یابد، در حالی که کسر جرمی تمامی محصولات با افزایش ارتفاع افزایش می‌یابد. هنگامی که خوراک نفت‌گاز وارد رآکتور می‌شود و در تماس با کاتالیست قرار می‌گیرد، به محصولات مختلف شکسته می‌شود و در طول جریان رآکتور به بالا منتقل می‌شود. با افزایش ارتفاع رآکتور، میزان شکست خوراک و زمان تماس آن با کاتالیست افزایش می‌یابد و در نتیجه کسر جرمی نفت‌گاز از مقدار اولیه 1/0 در ورودی رآکتور به مقدار حداقل خود در خروجی رآکتور کاهش می‌یابد. این در حالی است که کسر جرمی محصولات از مقدار صفر در ورودی به حداکثر مقدار خود در خروجی افزایش می‌یابد. مشاهده می‌شود که گرادیان تغییرات کسر جرمی نفت‌گاز در نزدیکی ورودی رآکتور به طور قابل توجهی بیشتر از خروجی رآکتور است که در نتیجه آن این موضوع برای کلیه محصولات نیز صادق می‌باشد. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که بیشتر واکنش‌های شکست در نزدیکی پایین رآکتور رخ می‌دهند. به طور دقیق‌تر می‌توان گفت که روند تولید گازوئیل و بنزین در 5 متر پایین رآکتور بسیار سریعتر است، زیرا هم تجمع کاتالیست در ابتدای رآکتور بیشتر بوده و هم

فعالیت کاتالیست و دمای رآکتور بالاتر می‌باشد. در نتیجه می‌توان گفت که فرآیند شکست در ابتدای رآکتور بالا رونده با سرعت بالاتری اتفاق می‌افتد. لازم به ذکر است که با پیشروی در طول رآکتور و افزایش تولید محصولات جانبی روند افزایشی بازده گازوئیل و بنزین کاهش یافته است. در شکل 4-ب تغییرات دمایی رآکتور به عنوان تابعی از ارتفاع آن نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که در 5 متر ابتدایی رآکتور دما با سرعت بیشتری کاهش می‌یابد. این موضوع خود تایید دیگری بر این نکته است که بیشتر واکنش‌های شکست در این ناحیه رخ می‌دهند. از آنجایی که واکنش‌های شکست گرماگیر هستند، دما و فعالیت کاتالیست با افزایش ارتفاع رآکتور کاهش می‌یابد. این موضوع خود باعث کاهش نرخ واکنش و همچنین کاهش میزان حرارت جذب شده توسط واکنش‌های شکست می‌شود. در بیشتر واحدهای FCC، دمای رآکتور به عنوان اصلی‌ترین کنترل کننده شدت واکنش‌های شکست مورد استفاده قرار می‌گیرد. افزایش نقطه تنظیم دمای رآکتور، به سیستم کنترل جریان کاتالیست احیا شده سیگنال ارسال کرده تا جریان کاتالیست داغ افزایش یابد که در نتیجه آن دمای خروجی رآکتور مورد نظر به دست آید. نرخ گردش کاتالیست افزایش یافته، خود منجر به افزایش تبدیل فرآیند می‌شود. دمای بالاتر شکست، عدد اکتان بنزین و الفینیته گاز مایع را افزایش می‌دهد. با پتانسیل آن‌ها برای تغذیه الکیلاسیون، بنزین تولید شده در دمای بالا به عنوان مؤلفه‌های مخلوط کردنی خاص برای بنزین بدون سرب مفید هستند.

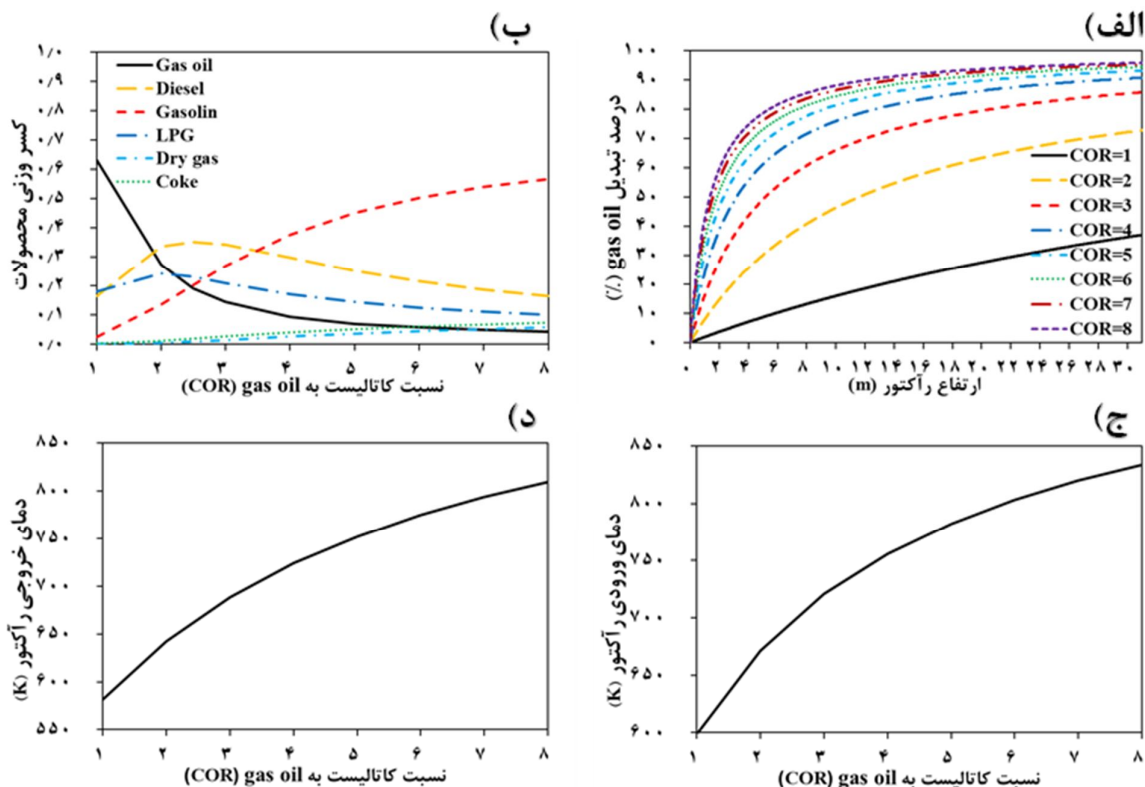


شکل 4- عملکرد رآکتور در شرایط طراحی جدول 4 الف) تغییرات کسر وزنی اجزا در طول رآکتور. ب) تغییرات دما در طول رآکتور

3-3- آنالیز حساسیت

در تعیین عملکرد مطلوب سیستم، انتخاب شرایط عملیاتی مناسب حائز اهمیت است. بنابراین، به منظور بررسی حساسیت خروجی فرآیند نسبت به متغیرهای موثر ورودی، آنالیز حساسیت به انجام می‌رسد. در این پژوهش اثر پارامترهای نسبت کاتالیست به خوراک (COR)، نرخ خوراک ورودی، دمای خوراک ورودی و دمای کاتالیست ورودی مورد بررسی قرار گرفته است. نسبت COR یکی از پارامترهای مهم در فرآیند FCC است به طوری که درصد تبدیل خوراک و توزیع محصولات فرآیند شکست به این نسبت وابسته است. شکل 5-الف نشان می‌دهد که با افزایش نسبت COR، درصد تبدیل خوراک در طول رآکتور افزایش می‌یابد. افزایش درصد تبدیل خوراک، تبدیل هیدروکربن‌های درشت به هیدروکربن‌های کوچکتر را در پی دارد. بنابراین میزان شکست نفت‌گاز به هیدروکربن‌های سبک‌تر افزایش می‌یابد. نتایج شکل 5-ب نیز این موضوع را تایید می‌کند. مشاهده می‌شود که کسر وزنی نفت‌گاز در محصولات با

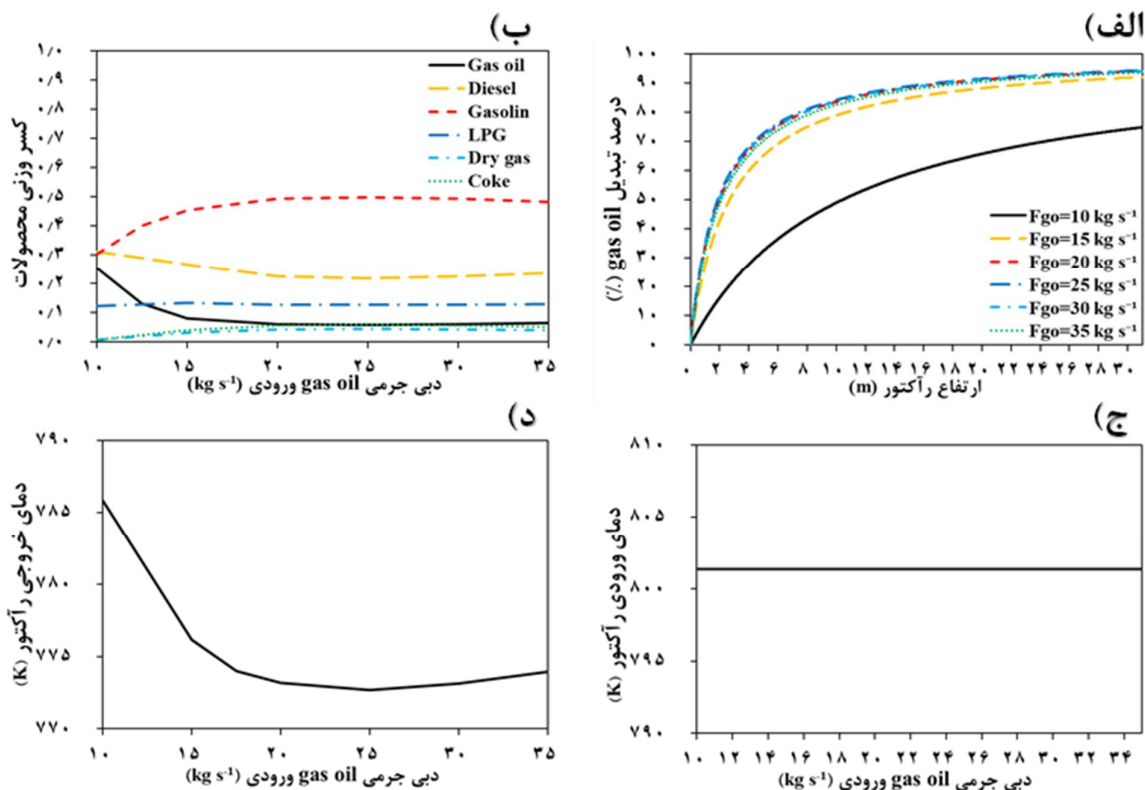
افزایش نسبت COR از 1 به 5 با شیب بالایی کاهش می‌یابد و سپس برای $COR \geq 5$ در حداقل مقدار خود تقریباً ثابت باقی می‌ماند. با افزایش نسبت COR ، میزان کسر جرمی محصولات بنزین، گاز سبک و کک افزایش و میزان کسر جرمی محصولات گازوئیل و گاز مایع در ابتدا افزایش و سپس کاهش می‌یابد. در واقع می‌توان گفت که تولید گازوئیل با افزایش نسبت COR تا زمانی که نسبت بهینه برای حداکثر تولید را بگذراند، افزایش می‌یابد. با افزایش این نسبت بهینه، تولید گازوئیل کاهش خواهد یافت در حالی که تولید بنزین همچنان افزایش می‌یابد. این به دلیل آن است که در غلظت کاتالیست بالا (نسبت COR بالا)، شکست ثانویه مولفه‌های در محدوده گازوئیل افزایش یافته که در نهایت باعث افزایش تولید بنزین و کاهش تولید گازوئیل می‌شود. در واقع می‌توان گفت که افزایش نسبت COR منجر به افزایش میزان غلظت کاتالیست درون واحد می‌شود که به معنای وجود سایت‌های فعال بیشتر برای واکنش شکست است. بنابراین نرخ شکست اولیه و ثانویه افزایش خواهد یافت. به طور کلی نسبت COR بهینه برای حداکثر تولید گازوئیل کمتر از نسبت بهینه برای حداکثر تولید بنزین است. دلیل آن را می‌توان به میزان شکست کمتر خوراک با نسبت COR پایین‌تر مربوط دانست. نسبت COR بالاتر، غلظت بالاتری از سایت‌های فعال کاتالیست را در اختیار قرار می‌دهد که باعث افزایش نرخ واکنش و گزینش‌پذیری بهتر برای شکست کاتالیستی می‌شود. بنابراین می‌توان گفت که نسبت COR بزرگتر تا حدودی برای تولید بنزین مناسب‌تر است. بر اساس شکل 5-ج و 5-د نیز لازم به ذکر است که با افزایش نسبت COR دمای ورودی و خروجی رآکتور افزایش می‌یابد. این افزایش دما را می‌توان به افزایش آنتالپی جریان ورودی داغ مربوط دانست. می‌توان گفت که با افزایش دما، نرخ شکست خوراک نیز افزایش می‌یابد.



شکل 5- تاثیر نسبت کاتالیست به خوراک ورودی (COR) بر الف) درصد تبدیل نفت گاز، ب) کسر وزنی محصولات، ج)

دمای ورودی رآکتور، د) دمای خروجی رآکتور. در شرایط عملیاتی مطابق جدول 4

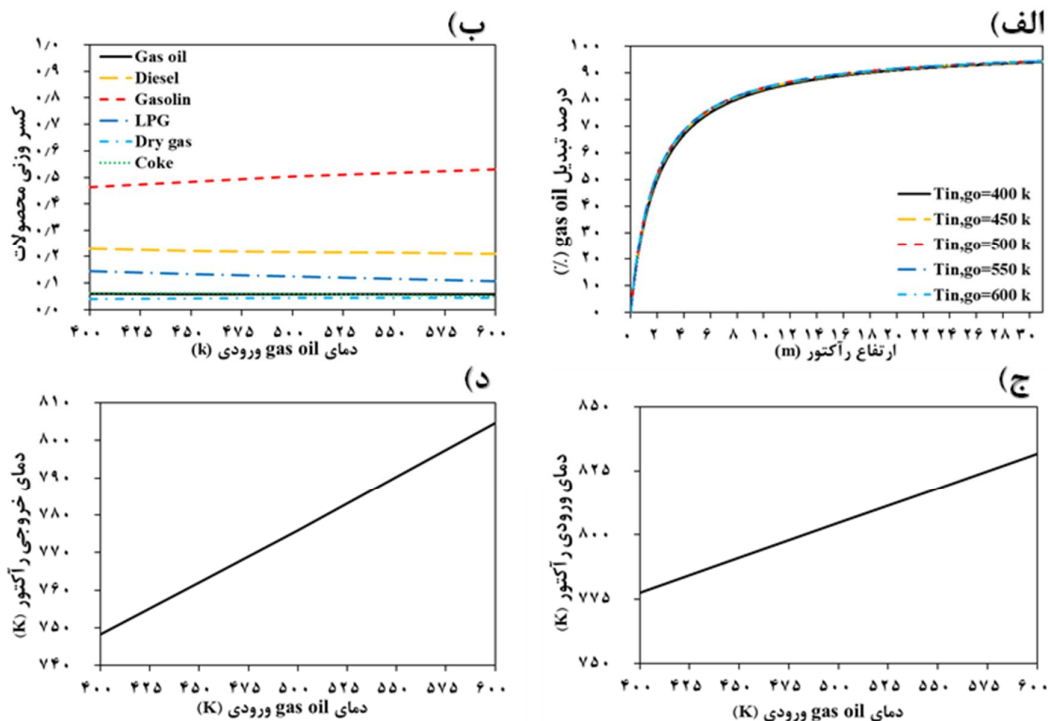
اثر تغییر نرخ خوراک ورودی بر عملکرد سیستم در شکل 6 مورد بررسی قرار گرفته است. می توان گفت که با افزایش نرخ خوراک ورودی، زمان اقامت جریان گاز و کاتالیست درون رآکتور کاهش می یابد. از این رو، زمان تماس بین گاز و کاتالیست نیز کاهش خواهد یافت. از سوی دیگر، ثابت بودن مقدار COR باعث می شود تا میزان کاتالیست درون سیستم افزایش یابد. بنابراین در این شرایط افزایش میزان گاز و کاتالیست و کاهش زمان اقامت/تماس به طور همزمان بر عملکرد سیستم تاثیرگذار خواهند بود. همانطور که در شکل 6-الف مشاهده می شود، با افزایش نرخ خوراک ورودی، درصد تبدیل نفت گاز در ابتدا افزایش می یابد و در نرخ خوراک 20 kg s^{-1} به بیشترین مقدار خود رسیده و پس از آن نیز ثابت باقی می ماند. تاثیرگذاری همزمان افزایش میزان گاز و کاتالیست و کاهش زمان اقامت/تماس در این سیستم سبب شده است تا نرخ خوراک 20 kg s^{-1} به عنوان یک نقطه عطف مطرح شود به طوری که سیستم پیش و پس از این نقطه رفتار متفاوتی را از خود نشان دهد. از شکل 6-ب نیز مشخص است که بازده تولید گازوئیل با افزایش نرخ خوراک ورودی در ابتدا کاهش یافته و پس از این نقطه عطف تقریباً ثابت باقی مانده است. کسر جرمی بنزین نیز با افزایش نرخ خوراک ورودی به حداکثر مقدار خود (حدوداً 50٪) رسیده و سپس در حدود همین مقدار ثابت باقی می ماند. به طور دقیق تر می توان گفت که افزایش اولیه کسر جرمی بنزین ممکن است به دلیل تعادل بین زمان تماس کمتر کاتالیست و خوراک ورودی و همچنین افزایش مقدار خوراک وارد شده به رآکتور در واحد زمان باشد، به طوری که نرخ شکست خوراک افزایش یابد. همچنین، تأثیر کاتالیست بر پایه زئولیت و خاصیت منحصر به فرد آن در افزایش بازده بنزین نیز در این خصوص غیر قابل چشم پوشی است. با افزایش نرخ جریان جرمی خوراک به بیش از 1 kg s^{-1} 20، کاهش زمان تماس خوراک و کاتالیست به میرانی رسیده که شکست بیشتر آن را تضمین نمی کند و در نتیجه کسر وزنی بنزین در محصولات تقریباً ثابت باقی خواهد ماند. شکل 6-ج نشان می دهد که با افزایش نرخ جریان خوراک ورودی، دمای ورودی به رآکتور ثابت باقی می ماند. ثابت بودن دمای ورودی به رآکتور در این شرایط را می توان به ثابت بودن نسبت کاتالیست به خوراک (COR) مربوط دانست. بر این اساس و بر طبق موازنه انرژی ورودی رآکتور ارائه شده در رابطه 8، دمای ورودی رآکتور ثابت باقی خواهد ماند. با این وجود و بر اساس نتایج به دست آمده در شکل 6-د، دمای خروجی رآکتور مجداً تحت تاثیر اثر همزمان افزایش میزان گاز و کاتالیست و کاهش زمان اقامت/تماس قرار می گیرد. در این شرایط با افزایش نرخ خوراک ورودی، دمای خروجی رآکتور در ابتدا کاهش یافته و پس از آن تقریباً ثابت باقی خواهد ماند.



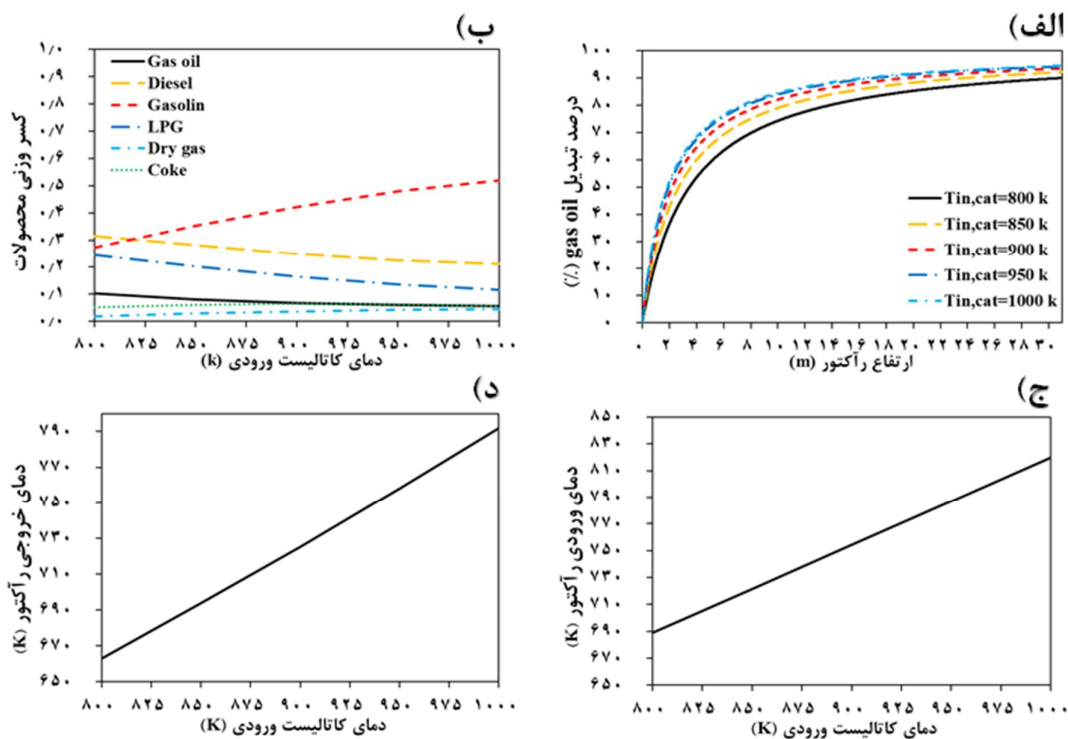
شکل 6- تاثیر نرخ جریان خوراک ورودی بر (الف) درصد تبدیل نفت-گاز، (ب) کسر وزنی محصولات، (ج) دمای ورودی رآکتور، (د) دمای خروجی رآکتور. در شرایط عملیاتی مطابق جدول 4

با افزایش دمای خوراک ورودی، اختلاف دمای بین خوراک و رآکتور کاهش می‌یابد که این به معنی کاهش انرژی مورد نیاز شکست است. در شکل 7-الف و 7-ب تأثیر دمای خوراک ورودی بر درصد تبدیل نفت-گاز و بازده محصولات فرآیند نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که تغییر کسر وزنی محصولات و درصد تبدیل نفت-گاز با دمای خوراک ورودی تقریباً مستقل از یکدیگراند. در شکل 7-ب مشاهده می‌شود که با افزایش دمای خوراک ورودی، کسر وزنی گازوئیل و گاز مایع در محصولات تنها به مقدار ناچیزی کاهش می‌یابد. همچنین کسر وزنی بنزین نیز اندکی افزایش می‌یابد. از شکل‌های 7-ج و 7-د نیز به وضوح مشخص است که به دنبال افزایش دمای خوراک ورودی، دمای ورودی و خروجی رآکتور نیز افزایش خواهد یافت.

بر اساس نتایج ارائه شده در شکل 8-الف و 8-ب، افزایش دمای کاتالیست ورودی شدت شکست خوراک را افزایش می‌دهد. به دنبال شدت بالاتر شکست، گازوئیل با نرخ بالاتری شکسته شده و بازده آن درون محصولات کاهش می‌یابد. در نتیجه آن میزان تولید بنزین افزایش خواهد یافت. با این وجود، سینتیک حاکم بر فرآیند شکست نشان می‌دهد که در این شرایط شدت شکست در جهت تولید بنزین غالب بوده و از این رو بازده تولید گاز مایع و گاز سبک روند افزایشی مشخصی را از خود نشان نمی‌دهد. مجدداً از شکل‌های 8-ج و 8-د نیز مشخص است که در پی افزایش دمای کاتالیست ورودی، دمای ورودی و خروجی رآکتور نیز افزایش خواهد یافت.



شکل 7- تاثیر دمای خوراک ورودی بر الف) درصد تبدیل نفت‌گاز. ب) کسر وزنی محصولات. ج) دمای ورودی رآکتور. د) دمای خروجی رآکتور. در شرایط عملیاتی مطابق جدول 4



شکل 8- تاثیر دمای کاتالیست ورودی بر الف) درصد تبدیل نفت‌گاز. ب) کسر وزنی محصولات. ج) دمای ورودی رآکتور. د) دمای خروجی رآکتور. در شرایط عملیاتی مطابق جدول 4

4- نتیجه‌گیری

در این پژوهش یک رویکرد مبتنی بر مدل‌سازی به منظور طراحی و بررسی عملکرد رآکتور بالارونده فرآیند شکست کاتالیستی بستر سیال معرفی و به کار گرفته شد. در ابتدا، مدل عددی حاکم بر رآکتور توسعه یافت و به دنبال آن الگوریتمی به منظور طراحی رآکتور پیشنهاد گردید. با مقایسه نتایج حاصل از شبیه‌سازی با نتایج تجربی در دسترس از یک واحد صنعتی، اعتبار مدل توسعه‌یافته به اثبات رسید. میزان انحراف نتایج حاصل از شبیه‌سازی و داده‌های تجربی برای کسر وزنی نفت‌گاز، کسر وزنی گازوئیل، کسر وزنی بنزین، کسر وزنی گاز مایع، کسر وزنی گاز سبک، کسر وزنی کک و دمای خروجی رآکتور به ترتیب برابر $10/67\%$ ، $13/35\%$ ، $1/99\%$ ، $1/19\%$ ، $8/70\%$ ، $11/56\%$ ، و $5/20\%$ به دست آمد. پس از اعتبارسنجی مدل و با بهره‌گیری از الگوریتم طراحی پیشنهادی، طرح نهایی رآکتور بر اساس خوراک ورودی نفت‌گاز با دبی جرمی $24/1 \text{ kg s}^{-1}$ ارائه شد. با انجام چرخه‌های تکرارشونده، قطر رآکتور برابر 82 cm ، ارتفاع رآکتور برابر 31 m و نرخ گردش کاتالیست برابر $142/19 \text{ kg s}^{-1}$ به دست آمد. کسر تبدیل نفت‌گاز در طراحی پیشنهادی $94/32\%$ بوده و کسر وزنی گازوئیل، بنزین، گاز مایع، گاز سبک و کک در محصولات نیز به ترتیب برابر $21/66\%$ ، $49/82\%$ ، $12/55\%$ ، $35/4\%$ و $5/94\%$ به دست آمد. آنالیز حساسیت انجام شده بر پارامترهای عملیاتی رآکتور نیز نشان داد که با افزایش نسبت COR، میزان کسر جرمی محصولات بنزین، گاز سبک و کک افزایش و میزان کسر جرمی محصولات گازوئیل و گاز مایع در ابتدا افزایش و سپس کاهش می‌یابد. با افزایش نرخ جریان جرمی خوراک تا حدود 20 kg s^{-1} ، کسر جرمی بنزین تا حدود 50% افزایش یافته و به حداکثر مقدار خود می‌رسد. پس از آن، کاهش زمان تماس خوراک و کاتالیست به میزانی رسیده که شکست بیشتر آن را تضمین نمی‌کند و در نتیجه کسر وزنی بنزین در محصولات تقریباً در همین محدوده ثابت باقی خواهد ماند. تغییر کسر وزنی محصولات و درصد تبدیل نفت‌گاز با دمای خوراک ورودی تقریباً مستقل از یکدیگراند. با این وجود، افزایش دمای کاتالیست ورودی شدت شکست خوراک را افزایش خواهد داد. به دنبال شدت بالاتر شکست، گازوئیل با نرخ بالاتری شکسته شده و بازده آن درون محصولات کاهش می‌یابد. در نتیجه آن، میزان تولید بنزین افزایش خواهد یافت.

5- فهرست علائم

علائم انگلیسی

A	سطح مقطع، m^2
C_p	ظرفیت گرمایی ویژه، $\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$
D	قطر، m
E	انرژی فعال‌سازی، J mol^{-1}
F	دبی جرمی، kg s^{-1}
g	ثابت گرانش، m s^{-2}
G	شار جرمی، $\text{kg m}^{-2}\text{s}^{-1}$
H	آنتالپی، J kg^{-1}
K	ثابت سینتیکی، s^{-1}
MW	جرم مولکولی، g mol^{-1}

ثابت جهانی گازها، $\text{j mol}^{-1}\text{k}^{-1}$	R
زمان، s	t
دما، k	T
سرعت، m s^{-1}	u
درصد کک، %	w
کسر وزنی، -	y
ارتفاع، m	z
علائم یونانی	
چگالی، kg m^{-3}	ρ
ویسکوزیته، Pa s	μ
تابع غیرفعال شدن کاتالیست، -	ϕ
فاکتور لغزش، -	ψ
تخلخل، -	ε
زیرنویس	
ورودی	0
کاتالیست	cat
غیرفعال شدن	d
نفت گاز	go
ورودی	in
خروجی	out
رآکتور	R
تبخیر	vap

6- منابع

- [1] R. Sadeghbeigi, *Fluid catalytic cracking handbook: An expert guide to the practical operation, design, and optimization of FCC units*. Butterworth-Heinemann, 2020.
- [2] O. Analouie, K. Pourabdollah Ghahfarrokhi, and M. Eisazadeh, "Optimization of the Effect of Various Parameters on the Reactor of FCC Unit Using Simulation in Petro-SIM Software," *Farayandno*, vol. 15, no. 71, pp. 21–37, 2020.
- [3] H. Norouzi and H. Norouzi, "CFD Modeling of a two stage RFCC Regenerator," *Farayandno*, vol. 12, no. 57, pp. 69–82, 2017.
- [4] X. Zhao and S. Sun, "Lumped Kinetic Modeling Method for Fluid Catalytic Cracking," *Chem. Eng. Technol.*, vol. 43, no. 12, pp. 2493–2500, 2020.
- [5] K. Xiong, C. Lu, Z. Wang, and X. Gao, "Kinetic study of catalytic cracking of heavy oil over an in-situ crystallized FCC catalyst," *Fuel*, vol. 142, pp. 65–72, 2015.
- [6] C. I. C. Pinheiro *et al.*, "Fluid catalytic cracking (FCC) process modeling, simulation, and control," *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 51, no. 1, pp. 1–29, 2012.
- [7] S. Maghsoudy, O. Bakhtiari, and S. Maghsoudy, "Tortuosity prediction and investigation of fluid

- flow behavior using pore flow approach in heap leaching,” *Hydrometallurgy*, vol. 211, p. 105868, 2022.
- [8] H. Talebi, S. Maghsoudy, and S. Habibzadeh, “Synthesis and Characterization of Corrosion Inhibitor Nanoparticles in Oil and Gas Industry,” *J. Iran. Chem. Eng.*, vol. 21, no. 124, pp. 7–29, 2022.
- [9] I.-S. Han and C.-B. Chung, “Dynamic modeling and simulation of a fluidized catalytic cracking process. Part I: Process modeling,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 56, no. 5, pp. 1951–1971, 2001.
- [10] F. Yahyazadeh Saravi, M. R. Ghasemi, and A. H. Nazemi, “Modelling of FCC process based on cluster size variation along the riser,” *J. Model. Eng.*, vol. 10, no. 30, pp. 87–97, 2012.
- [11] Y. Behjat, S. Shahhosseini, and M. M. Ahmadi, “Modeling of gas-liquid-solid multiphase flow of FCC riser reactor,” *Pet. Res.*, vol. 20, no. 62, pp. 52–64, 2010.
- [12] M. Sadi, J. Sadeghzade Ahari, and A. Farshi, “Mathematical modeling of regenerator reactor in fluidized catalytic cracking process,” *Pet. Res.*, vol. 20, no. 62, pp. 16–27, 2010.
- [13] A. Afshar Ebrahimi, H. Mousavi, H. Bayesteh, and J. Towfighi, “Nine-lumped kinetic model for VGO catalytic cracking; using catalyst deactivation,” *Fuel*, vol. 231, no. January, pp. 118–125, 2018..
- [14] A. G. Sani, H. A. Ebrahim, and M. J. Azarhoosh, “8-Lump kinetic model for fluid catalytic cracking with olefin detailed distribution study,” *Fuel*, vol. 225, no. April 2017, pp. 322–335, 2018.
- [15] Y. M. John, M. A. Mustafa, R. Patel, and I. M. Mujtaba, “Parameter estimation of a six-lump kinetic model of an industrial fluid catalytic cracking unit,” *Fuel*, vol. 235, pp. 1436–1454, 2019.
- [16] B. C. Gates, J. R. Katzer, and G. C. A. Schuit, “Chemistry of catalytic processes,” 1979.
- [17] J. Zhang, Z. Wang, H. Jiang, J. Chu, J. Zhou, and S. Shao, “Modeling fluid catalytic cracking risers with special pseudo-components,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 102, pp. 87–98, 2013.
- [18] Y. P. Du, Q. Yang, H. Zhao, and C. H. Yang, “An integrated methodology for the modeling of Fluid Catalytic Cracking (FCC) riser reactor,” *Appl. Petrochemical Res.*, vol. 4, pp. 423–433, 2014.
- [19] K. Yaghubi, N. Gilani, and S. Zahedi Abghari, “A Review on the Modeling and Optimization of Fluid Catalytic Cracking Unit,” *Nashrieh Shimi va Mohandesi Shimi Iran*, vol. 38, no. 1, pp. 125–156, 2019.
- [20] P. K. Dasila, I. R. Choudhury, S. Singh, S. Rajagopal, S. J. Chopra, and D. N. Saraf, “Simulation of an industrial fluid catalytic cracking riser reactor using a novel 10-lump kinetic model and some parametric sensitivity studies,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 53, no. 51, pp. 19660–19670, 2014.
- [21] D. Arya and R. K. Gupta, “Simulation studies on variable cluster size in FCC riser reactor,” *Part. Sci. Technol.*, vol. 32, no. 2, pp. 144–150, 2014.
- [22] V. W. Weekman Jr and D. M. Nace, “Kinetics of catalytic cracking selectivity in fixed, moving, and fluid bed reactors,” *AIChE J.*, vol. 16, no. 3, pp. 397–404, 1970.
- [23] L. C. Yen, R. E. Wrench, and A. S. Ong, “Reaction kinetic correlation equation predicts fluid catalytic cracking coke yields,” *Oil Gas J.:(United States)*, vol. 86, no. 2, 1988.
- [24] L. Lee, Y. Chen, T. Huang, and W. Pan, “Four-lump kinetic model for fluid catalytic cracking process,” *Can. J. Chem. Eng.*, vol. 67, no. 4, pp. 615–619, 1989.
- [25] J. Ancheyta-Juárez, F. López-Isunza, E. Aguilar-Rodríguez, and J. C. Moreno-Mayorga, “A strategy for kinetic parameter estimation in the fluid catalytic cracking process,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 36, no. 12, pp. 5170–5174, 1997.
- [26] M. Larocca, S. Ng, and H. De Lasa, “Fast catalytic cracking of heavy gas oils: modeling coke deactivation,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 29, no. 2, pp. 171–180, 1990.
- [27] R. Karimzadeh and Z. Nargessi, “Six-lumped kinetic model for catalytic cracking of heavy gas oil over zeolite Y; considering deactivation catalyst,” *Fuel Combust.*, vol. 14, no. 1, pp. 47–60, 2021.
- [28] T. Takatsuka, S. Sato, Y. Morimoto, and H. Hashimoto, “A reaction model for fluidized-bed catalytic cracking of residual oil,” *Int. Chem. Eng.*, vol. 27, no. 1, pp. 107–116, 1987.
- [29] D. W. Kraemer, “Modelling catalytic cracking in a novel riser simulator (volumes I And Ii),”

Digit. Theses, no. 1935, 1991.

[30] S. M. Jacob, B. Gross, S. E. Voltz, and V. W. Weekman Jr, "A lumping and reaction scheme for catalytic cracking," *AIChE J.*, vol. 22, no. 4, pp. 701–713, 1976.

[31] Y. Du, Q. Yang, C. Zhang, and C. Yang, "Ten-lump kinetic model for the two-stage riser catalytic cracking for maximizing propylene yield (TMP) process," *Appl. Petrochemical Res.*, vol. 5, pp. 297–303, 2015.

[32] P. G. Coxson and K. B. Bischoff, "Lumping strategy. 1. Introductory techniques and applications of cluster analysis," *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 26, no. 6, pp. 1239–1248, 1987.

[33] K. Zhu, X. Mao, H. Weng, Z. Zhu, and F. Liu, "Investigation of the lumped kinetic model for catalytic cracking: II. A prior simulation for experimental planning," *Acfa Pet. Sin. (Pet. Process Sect.)*, vol. 1, p. 47, 1985.

[34] L. L. Oliveira, "Estimação de parâmetros e avaliação de modelos de craqueamento catalítico." M. Sc. Thesis (in Portuguese), University Federal do Rio de Janeiro, Brazil, 1987.

[35] G. Zong, H. Ning, H. Jiang, and F. Ouyang, "The lumping kinetic model for the heavy oil catalytic cracking MIP process," *Pet. Sci. Technol.*, vol. 28, no. 17, pp. 1778–1787, 2010.

[36] Y. Sa, X. Liang, X. Chen, and J. Liu, "Study of 13-lump kinetic model for residual catalytic cracking," *Petrochem Eng Cor*, pp. 145–152, 1995.

[37] I. Pitault, D. Nevicato, M. Forissier, and J.-R. Bernard, "Kinetic model based on a molecular description for catalytic cracking of vacuum gas oil," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 49, no. 24, pp. 4249–4262, 1994.

[38] A. Vorobev, V. Chuzlov, E. Ivashkina, and A. Antonov, "Simple Model of an Industrial Catalytic Cracking Riser Reactor," *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 62, no. 51, pp. 22005–22015, 2023.

[39] H. Zhong, J. Zhang, S. Liang, and Y. Zhu, "Two-fluid model with variable particle–particle restitution coefficient: Application to the simulation of FCC riser reactor," *Part. Sci. Technol.*, vol. 38, no. 5, pp. 549–558, 2020.

[40] Y. Du, X. Chen, S. Li, A. S. Berrouk, W. Ren, and C. Yang, "Revisiting a large-scale FCC riser reactor with a particle-scale model," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 249, p. 117300, 2022.

[41] Z. Nargessi and R. Karimzadeh, "Analysis of heat and mass transfer and parametric sensitivity in an experimental fixed-bed reactor for the catalytic cracking of heavy hydrocarbons based on modeling and experiments," *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 60, no. 13, pp. 4831–4846, 2021.

[42] Z. Chen, G. Wang, S. Zhao, and L. Zhang, "Prediction of molecular distribution and temperature profile of FCC process through molecular-level kinetic modeling," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 264, p. 118189, 2022.

[43] Y. Zhang, Z. Wang, Y. Jin, Z. Li, and W. Yi, "Kinetic study of catalytic cracking on the effect of reaction parameters in short-contact cyclone reactors," *Chem. Eng. Res. Des.*, vol. 119, pp. 188–197, 2017.

[44] M. Heydari, H. A. Ebrahim, and B. Dabir, "Modeling of an industrial riser in the fluid catalytic cracking unit," *Am. J. Appl. Sci.*, vol. 7, no. 2, p. 221, 2010.

[45] C. W. Chan, J. P. K. Seville, D. J. Parker, and J. Baeyens, "Particle velocities and their residence time distribution in the riser of a CFB," *Powder Technol.*, vol. 203, no. 2, pp. 187–197, 2010.

[46] I. S. Han and C. B. Chung, "Dynamic modeling and simulation of a fluidized catalytic cracking process. Part II: Property estimation and simulation," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 56, no. 5, pp. 1973–1990, 2001.

[47] J. S. Ahari, A. Farshi, and K. Forsat, "A mathematical modeling of the riser reactor in industrial FCC unit," *Pet. Coal*, vol. 50, no. 2, pp. 15–24, 2008.

[48] D. A. Jack, E. U. Philip, and U. Awajogak, "Modelling fluid catalytic cracking reactor for cracking of gas oil," *Int. Res. J. Mod. Eng. Technol. Sci.*, vol. 4, no. 5, pp. 4704–4723, 2022.