

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



تاییدیه اعضای هیات داوران حاضر در جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد

آقای وحید متین پایان نامه ۶ واحدی خود را با عنوان مدل سازی و شبیه سازی راکتور کاتالیستی - غشائی هیدروژن زدایی اتان در تاریخ ۱۳۹۱/۱۱/۲۸ ارائه کردند. اعضای هیات داوران نسخه نهایی این پایان نامه را از نظر فرم و محتوا تایید کرده، پذیرش آنرا برای اخذ درجه کارشناسی ارشد مهندسی شیمی پیشنهاد می کنند.

عضو هیات داوران	نام و نام خانوادگی	رتبه علمی	امضا
استاد راهنما	دکتر رامین کریم زاده	دانشیار	
استاد ناظر	دکتر مجتبی صدر عاملی	استاد	
استاد ناظر	دکتر آرزو جعفری	استادیار	
استاد ناظر	دکتر نوراله کنیری	دانشیار	
مدیر گروه (یا نماینده گروه تخصصی)	دکتر مجتبی صدر عاملی	استاد	

این نسخه به عنوان نسخه نهایی پایان نامه / رساله مورد تأیید است
امضاء استاد راهنما

آیین‌نامه حق مالکیت مادی و معنوی در مورد نتایج پژوهشهای علمی دانشگاه تربیت مدرس

مقدمه: با عنایت به سیاست‌های پژوهشی و فناوری دانشگاه در راستای تحقق عدالت و کرامت انسانها که لازمه شکوفایی علمی و فنی است و رعایت حقوق مادی و معنوی دانشگاه و پژوهشگران، لازم است اعضای هیأت علمی، دانشجویان، دانش‌آموختگان و دیگر همکاران طرح، در مورد نتایج پژوهشهای علمی که تحت عناوین پایان‌نامه، رساله و طرحهای تحقیقاتی با هماهنگی دانشگاه انجام شده است، موارد زیر را رعایت نمایند:

ماده ۱- حق نشر و تکثیر پایان‌نامه/ رساله و درآمدهای حاصل از آنها متعلق به دانشگاه می باشد ولی حقوق معنوی پدید آورندگان محفوظ خواهد بود.

ماده ۲- انتشار مقاله یا مقالات مستخرج از پایان‌نامه/ رساله به صورت چاپ در نشریات علمی و یا ارائه در مجامع علمی باید به نام دانشگاه بوده و با تایید استاد راهنمای اصلی، یکی از اساتید راهنما، مشاور و یا دانشجو مسئول مکاتبات مقاله باشد. ولی مسئولیت علمی مقاله مستخرج از پایان‌نامه و رساله به عهده اساتید راهنما و دانشجو می باشد.

تبصره: در مقالاتی که پس از دانش‌آموختگی بصورت ترکیبی از اطلاعات جدید و نتایج حاصل از پایان‌نامه/ رساله نیز منتشر می‌شود نیز باید نام دانشگاه درج شود.

ماده ۳- انتشار کتاب، نرم افزار و یا آثار ویژه (اثری هنری مانند فیلم، عکس، نقاشی و نمایشنامه) حاصل از نتایج پایان‌نامه/ رساله و تمامی طرحهای تحقیقاتی کلیه واحدهای دانشگاه اعم از دانشکده ها، مراکز تحقیقاتی، پژوهشکده ها، پارک علم و فناوری و دیگر واحدها باید با مجوز کتبی صادره از معاونت پژوهشی دانشگاه و براساس آئین نامه های مصوب انجام شود.

ماده ۴- ثبت اختراع و تدوین دانش فنی و یا ارائه یافته ها در جشنواره‌های ملی، منطقه‌ای و بین‌المللی که حاصل نتایج مستخرج از پایان‌نامه/ رساله و تمامی طرح‌های تحقیقاتی دانشگاه باید با هماهنگی استاد راهنما یا مجری طرح از طریق معاونت پژوهشی دانشگاه انجام گیرد.

ماده ۵- این آیین‌نامه در ۵ ماده و یک تبصره در تاریخ ۸۷/۴/۱ در شورای پژوهشی و در تاریخ ۸۷/۴/۲۳ در هیأت رئیسه دانشگاه به تایید رسید و در جلسه مورخ ۸۷/۷/۱۵ شورای دانشگاه به تصویب رسیده و از تاریخ تصویب در شورای دانشگاه لازم‌الاجرا است.

«اینجانب محمد حسین محمدی سی دانشجوی رشته مهندسی سی ورودی سال تحصیلی ۱۳۸۹-۹۰ مقطع کارشناسی ارشد دانشکده مهندسی سی متعهد می شوم کلیه نکات مندرج در آئین نامه حق مالکیت مادی و معنوی در مورد نتایج پژوهش های علمی دانشگاه تربیت مدرس را در انتشار یافته های علمی مستخرج از پایان نامه / رساله تحصیلی خود رعایت نمایم. در صورت تخلف از مفاد آئین نامه فوق الاشعار به دانشگاه وکالت و نمایندگی می دهم که از طرف اینجانب نسبت به لغو امتیاز اختراع بنام بنده و یا هر گونه امتیاز دیگر و تغییر آن به نام دانشگاه اقدام نماید. ضمناً نسبت به جبران فوری ضرر و زیان حاصله بر اساس برآورد دانشگاه اقدام خواهم نمود و بدینوسیله حق هر گونه اعتراض را از خود سلب نمودم»

امضا: محمد حسین محمدی سی

تاریخ: ۹۴/۳/۵

آیین نامه چاپ پایان نامه (رساله) های دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس

نظر به اینکه چاپ و انتشار پایان نامه (رساله) های تحصیلی دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس، مبین بخشی از فعالیتهای علمی - پژوهشی دانشگاه است بنابراین به منظور آگاهی و رعایت حقوق دانشگاه، دانش آموختگان این دانشگاه نسبت به رعایت موارد ذیل متعهد می شوند:

ماده ۱: در صورت اقدام به چاپ پایان نامه (رساله) ی خود، مراتب را قبلاً به طور کتبی به «دفتر نشر آثار علمی» دانشگاه اطلاع دهد.

ماده ۲: در صفحه سوم کتاب (پس از برگ شناسنامه) عبارت ذیل را چاپ کند:

«کتاب حاضر، حاصل پایان نامه کارشناسی ارشد/ رساله دکتری نگارنده در رشته
سال در دانشکده دانشگاه تربیت مدرس به راهنمایی

سرکار خانم/جناب آقای دکتر ، مشاوره سرکار خانم/جناب آقای دکتر

و مشاوره سرکار خانم/جناب آقای دکتر از آن دفاع شده است.»

ماده ۳: به منظور جبران بخشی از هزینه های انتشارات دانشگاه، تعداد یک درصد شمارگان کتاب (در هر نوبت چاپ) را به «دفتر نشر آثار علمی» دانشگاه اهدا کند. دانشگاه می تواند مازاد نیاز خود را به نفع مرکز نشر در معرض فروش قرار دهد.

ماده ۴: در صورت عدم رعایت ماده ۳، ۵۰٪ بهای شمارگان چاپ شده را به عنوان خسارت به دانشگاه تربیت مدرس، تأدیه کند.

ماده ۵: دانشجو تعهد و قبول می کند در صورت خودداری از پرداخت بهای خسارت، دانشگاه می تواند خسارت مذکور را از طریق مراجع قضایی مطالبه و وصول کند؛ به علاوه به دانشگاه حق می دهد به منظور استیفای حقوق خود، از طریق دادگاه، معادل وجه مذکور در ماده ۴ را از محل توقیف کتابهای عرضه شده نگارنده برای فروش، تامین نماید.

ماده ۶: اینجانب وسید مسین دانشجوی رشته مهندسی مقطع کارشناسی ارشد

تعهد فوق و ضمانت اجرایی آن را قبول کرده، به آن ملتزم می شوم.

نام و نام خانوادگی: وسید مسین

تاریخ و امضا: ۹۲، ۳، ۵



دانشگاه تربیت مدرس
دانشکده مهندسی شیمی

پایان نامه دوره‌ی کارشناسی ارشد مهندسی شیمی

مدلسازی و شبیه‌سازی هیدروژن زدایی اتان در راکتور غشائی

کاتالیستی

وحید متین

استاد راهنما:

دکتر رامین کریم زاده

زمستان 1391

چکیده

واکنش هیدروژن زدایی اتان از جمله واکنش های مهم در صنعت می باشد که محصولات آن یعنی اتیلن و هیدروژن موارد مصرف بالایی دارند و استفاده از راکتورهای غشائی روشی برای غلبه بر محدودیت ترمودینامیکی این واکنش می باشد. در این پژوهش به توصیف و مدلسازی راکتور غشائی برای واکنش هیدروژن زدایی از اتان پرداخته شده است. راکتور غشایی مورد نظر شامل سه بخش لوله، سرامیک و پوسته می باشد که واکنش در بخش لوله که از کاتالیست پالادیمی پر شده است، انجام می گیرد. هیدروژن تولیدی توسط واکنش، از طریق غشاء متراکم پالادیمی که حول پایه سرامیکی قرار دارد و 100% نسبت به نفوذ هیدروژن تراواست؛ به درون پوسته نفوذ می کند. معادلات دیفرانسیل حاصل از انجام موازنه جرم و انرژی درون هر سه بخش راکتور توسط روش حجم محدود حل شده و نتایج مدل دو بعدی راکتور غشائی با نتایج حاصل از داده های موجود در مقالات مقایسه شده است و مشاهده شد هر چه زمان تماس بیشتر باشد مشابهت بیشتری بین نتایج مدل و داده های آزمایشگاهی برقرار است و در دمای 873 کلوین بالاترین میزان گزینش پذیری برای اتیلن در حدود 91/7% بدست می آید.

کلید واژه: هیدروژن زدایی، راکتور غشائی، مدلسازی ریاضی، روش حجم محدود، زمان تماس.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
أ	فهرست مطالب
ج	فهرست علائم و نشانه‌ها
و	فهرست جدول‌ها
ز	فهرست شکل‌ها
۱	فصل اول مقدمه پژوهش
۲	1-1 پیشگفتار
۲	2-1 راکتورهای غشائی
۳	3-1 مطالعات انجام شده روی راکتورهای غشائی
۷	4-1 هیدروژن زدایی در راکتورهای غشائی
۸	5-1 شکل راکتور، مشخصات کاتالیست و غشاء
۱۱	6-1 مشخصات خوراک
۱۱	7-1 ساز و کار انجام واکنش
۱۴	فصل دوم مدلسازی راکتور غشائی
۱۵	1-2 موازنه جرم و انرژی و شرایط مرزی در راکتور
۱۷	1-1-2 موازنه جرم سمت لوله
۲۰	2-1-2 موازنه جرم سمت پایه سرامیکی
۲۲	3-1-2 موازنه جرم سمت پوسته
۲۳	4-1-2 موازنه انرژی سمت لوله
۲۵	5-1-2 موازنه انرژی سمت لایه سرامیکی
۲۵	6-1-2 موازنه انرژی سمت پوسته
۲۵	2-2 حل معادلات جرم و انرژی
۲۷	3-2 محاسبه برخی کمیت‌های مورد نیاز در حل مسئله
۲۸	1-3-2 گرمای واکنش
۳۰	2-3-2 سرعت ظاهری
۳۱	3-3-2 چگالی ورودی
۳۲	4-3-2 گرانیروی
۳۴	5-3-2 ضریب نفوذ شعاعی موثر در سمت لوله
۳۶	6-3-2 ضریب هدایت شعاعی موثر

۳۷	7-3-2	ضرب نفوذ شعاعی موثر در سمت سرامیک
۳۷	8-3-2	ظرفیت گرمایی
۳۹		فصل سوم حل عددی معادلات
۴۰	1-3	روش حل
۴۵	2-3	حل معادلات جرم
۴۵	1-2-3	حل معادلات سمت لوله
۶۰	2-2-3	حل معادلات سمت پایه سرامیک
۶۲	3-2-3	حل معادلات سمت پوسته
۶۴	3-3	حل معادلات انرژی
۶۴	1-3-3	معادله انرژی سمت لوله
۶۸	2-3-3	معادله انرژی سمت لایه سرامیک
۷۱		فصل چهارم نتایج حل عددی
۷۲	1-4	مقایسه با نتایج آزمایشگاهی
۷۶	2-4	بررسی تاثیر کمیت‌های مختلف بر عملکرد راکتور
۷۶	1-2-4	تاثیر دما بر گزینش پذیری اتیلن
۷۸	2-2-4	پروفایل غلظت بر حسب طول راکتور در سمت لوله
۸۲	3-2-4	پروفایل غلظت بر حسب طول راکتور در سمت سرامیک و پوسته
۸۵	4-2-4	اثر دمای واکنش بر میزان تبدیل اتان
۸۶	5-2-4	تغییرات دما در طول راکتور
۸۷	6-2-4	نقشه رنگی تغییرات غلظت در سمت لوله
۸۹	7-2-4	تغییرات غلظت نسبت به شعاع سمت لوله
۹۲	8-2-4	تغییرات غلظت نسبت به شعاع سمت سرامیک
۹۴	9-2-4	تاثیر افزایش دما بر پروفایل‌های غلظت در راکتور
۹۹	10-2-4	اثر ضخامت غشاء بر میزان تبدیل اتان
۱۰۰		فصل پنجم نتیجه گیری و پیشنهادها
۱۰۱	1-5	نتیجه گیری
۱۰۲	2-5	پیشنهادها برای پژوهش‌های آتی
۱۰۳		مراجع

فهرست علائم و نشانه‌ها

واحد	نماد	نام علامت
m^2	A_m	سطح غشاء
$mol\ m^{-3}$	$C_i^{t,c,s}$	غلظت جزء i ام
$J\ mol^{-1}K^{-1}$	c_p	ظرفیت گرمایی
m^2s^{-1}	$D_{e_i}^{t,c}$	ضریب موثر نفوذ شعاعی جزء i ام
m^2s^{-1}	D_{ij}	نفوذ مولکولی جزء i در مخلوط دو جزئی i و j
m^2s^{-1}	D_{kn}	ضریب نفوذ نودسن
m	d_e	قطر معادل کانال حفره
m	d_c	قطر کاتالیست
$J\ mol^{-1}$	$-\Delta H_j$	اثر حرارتی واکنش j ام
m	l	طول راکتور
$g\ mole^{-1}$	M_i	وزن مولکولی جزء i ام
-	N	تعداد اجزاء در مخلوط واکنش
-	N_R	تعداد واکنش درون بخش داخلی راکتور
m	P_w	محیط قاعده‌ی لوله
atm	$P_{H_2}^t ; P_{H_2}^c ; P_{H_2}^s$	فشار جزئی هیدروژن درون لوله، در پایه سرامیکی و درون پوسته
$kmol\ m^{-1}s^{-1}atm^{-1/2}$	Q_0	ثابت تراوایی

$kmol s^{-1}$	Q_{H_2}	شدت تراوایی هیدروژن از میان غشاء
m	r_1	مختصات شعاعی درون لایه کاتالیستی
m	r_2	مختصات شعاعی درون پایه سرامیکی
m	r_{cap}	شعاع موئینگی
$J mol^{-1}K^{-1}$	R_g	ثابت جهانی گازها
%	S	گزینش پذیری
K	T^t, T^c, T^s	دما درون لوله، در پایه سرامیکی و در پوسته
$m s^{-1}$	u_z^t, u_z^s	سرعت محوری درون لوله و پوسته
$mol s^{-1}g_{cat}$	w_j	شدت واکنش
%	x	میزان تبدیل
	y_i	کسر مولی جزء اام
$Re_e = u_e d_e \rho_e / \mu$	Re_e	عدد رینولدز
$Sc = \mu / (\rho_g D_m)$	Sc	عدد اشمیت
$Pe = u d_p / D_e$	Pe	عدد پکلت

حروف یونانی

m	δ	ضخامت غشاء
-	$\varepsilon^t, \varepsilon^c$	تخلخل لایه کاتالیستی در لوله و سرامیک
-	γ_{ij}	ضریب استوکیومتری جزء ا درون واکنش j
$J m^{-1} s^{-1} K^{-1}$	λ_{ef}^t	ضریب موثر رسانش حرارتی شعاعی
$J m^{-1} s^{-1} K^{-1}$	λ^c	رسانش حرارتی پایه سرامیکی

$kg\ m^{-1}s^{-1}$	μ	گرانروی مخلوط گازی
$mol\ m^{-3}$	$\rho_G^{t,s}$	چگالی گاز
$g_{cat}\ m^{-3}$	$\rho_k^{t,s}$	چگالی کاتالیست درون بخش داخلی یا خارجی راکتور

اندیس‌ها

in	ورودی
t	سمت لوله
s	سمت پوسته
c	پایه سرامیکی
W	دیوار راکتور

فهرست جدول‌ها

-
- جدول 1-1 فهرست مشخصات راکتور غشایی ۱۰
- جدول 1-4 مقایسه میزان تبدیل اتان در شرایط همدمای 660 کلوین بر حسب زمان تماس با نتایج
آزمایشگاهی ۷۳
- جدول 2-4 میزان خطای مدلسازی در شرایط همدمای 660 کلوین و در زمان‌های تماس گوناگون ۷۵
- جدول 3-4 تغییرات گزینش پذیری اتیلن و تبدیل اتان بر حسب دما ۷۷

فهرست شکل‌ها

-
- شکل 1-1: ساختار راکتور غشائی ۹
- شکل 1-2: نمایی از راکتور غشائی ۱۵
- شکل 2-2: اطلاعات موجود برای ضریب هدایت شعاعی موثر ۳۶
- شکل 1-3: گره‌بندی یک حجم کنترل فرضی ۴۱
- شکل 2-3: نمای یک گره عمومی و گره‌های مجاورش و نحوه علامت‌گذاری گره‌ها ۴۱
- شکل 3-3: نمایی از یک حجم کنترل در یک شبکه بندی دو بعدی ۴۲
- شکل 4-3: نمایش گره‌بندی لوله، سرامیک و پوسته در جهت های شعاعی و طولی ۴۳
- شکل 3-5: یک المان از حجم کنترل ۴۶
- شکل 1-4: مقایسه میزان تبدیل اتان در شرایط همدمای 660 کلوین با مقادیر آزمایشگاهی ۷۴
- شکل 2-4: تغییرات گرینش پذیری اتیلن بر حسب دما ۷۸
- شکل 3-4: تغییرات غلظت اتان در سمت لوله بر حسب طول راکتور در دمای 873 کلوین ۷۹
- شکل 4-4: تغییرات میزان تبدیل اتان در سمت لوله بر حسب طول راکتور در دمای 873 کلوین ۸۰
- شکل 5-4: تغییرات غلظت هیدروژن بر حسب طول راکتور در سمت لوله در دمای 873 کلوین ۸۰
- شکل 6-4: تغییرات غلظت اتیلن در سمت لوله بر حسب طول راکتور در دمای 873 کلوین ۸۱
- شکل 7-4: تغییرات غلظت اتان در سمت سرامیک در طول راکتور و در دمای 873 کلوین ۸۲
- شکل 8-4: تغییرات غلظت اتیلن در سمت سرامیک در طول راکتور و دمای 873 کلوین ۸۳
- شکل 9-4: تغییرات غلظت هیدروژن در سمت سرامیک بر حسب طول راکتور و دمای 873 کلوین ۸۴
- شکل 10-4: تغییرات غلظت هیدروژن در سمت پوسته بر حسب طول راکتور و دمای 873 کلوین ۸۴
- شکل 11-4: تغییرات میزان تبدیل اتان بر حسب دمای واکنش ۸۵
- شکل 12-4: تغییرات دمای لوله بر حسب طول راکتور ۸۶
- شکل 13-4: تغییرات دمای سرامیک بر حسب طول راکتور ۸۷
- شکل 14-4: نمودار گرافیکی تغییرات غلظت اتان در سمت لوله و در دمای 873 کلوین بر حسب طول و شعاع راکتور ۸۸

- شکل 15-4 نمودار گرافیکی تغییرات غلظت اتیلن در سمت لوله و در دمای 873 کلوین بر حسب طول و شعاع راکتور ۸۹
- شکل 16-4 نمودار گرافیکی تغییرات غلظت هیدروژن در سمت لوله و در دمای 873 کلوین بر حسب طول و شعاع راکتور ۸۹
- شکل 17-4 روند تغییر غلظت اتان نسبت به شعاع لوله و در طول‌های مختلف راکتور در دمای 873 کلوین ۹۰
- شکل 18-4 روند تغییر غلظت هیدروژن نسبت به شعاع لوله و در طول‌های مختلف راکتور در دمای 873 کلوین ۹۰
- شکل 19-4 روند تغییر غلظت اتیلن نسبت به شعاع لوله و در طول‌های مختلف راکتور در دمای 873 کلوین ۹۱
- شکل 20-4 تغییرات غلظت اتان در پایه سرامیکی نسبت به شعاع در طول‌های مختلف راکتور در دمای 873 کلوین ۹۲
- شکل 21-4 تغییرات غلظت اتیلن در پایه سرامیکی نسبت به شعاع در طول‌های مختلف راکتور در دمای 873 کلوین ۹۳
- شکل 22-4 تغییرات غلظت هیدروژن در پایه سرامیکی نسبت به شعاع در طول‌های مختلف راکتور در دمای 873 کلوین ۹۴
- شکل 23-4 نقش افزایش دما بر پروفایل غلظت اتان در سمت لوله ۹۵
- شکل 24-4 نقش افزایش دما بر پروفایل غلظت اتیلن در سمت لوله ۹۵
- شکل 25-4 نقش افزایش دما بر پروفایل غلظت هیدروژن در سمت لوله ۹۶
- شکل 26-4 نقش افزایش دما بر پروفایل غلظت اتان در سمت سرامیک ۹۷
- شکل 27-4 نقش افزایش دما بر پروفایل غلظت اتیلن در سمت سرامیک ۹۷
- شکل 28-4 نقش افزایش دما بر پروفایل غلظت هیدروژن در سمت سرامیک ۹۸
- شکل 29-4 نقش افزایش دما بر پروفایل غلظت هیدروژن در سمت پوسته ۹۸
- شکل 30-4 اثر افزایش ضخامت غشاء بر میزان تبدیل اتان در دمای 873 کلوین ۹۹

فصل اول

مقدمه پژوهش

1-1 پیشگفتار

اتیلن یکی از مهم‌ترین مواد شیمیایی پایه‌ای¹ به شمار می‌رود. اهمیت اتیلن به خاطر پیوند دوگانه موجود در ساختار مولکولی آن می‌باشد. این پیوند دوگانه باعث می‌شود که اتیلن بسیار فعال باشد. عمده‌ترین مورد مصرف اتیلن، تولید پلی اتیلن می‌باشد. از دیگر موارد استفاده مهم اتیلن می‌توان به کلرنزی² اتیلن دی‌کلراید، تولید پلی وینیل کلراید (PVC)، اکسایش اتیلن اکساید که ماده واسطه در تولید فیلم‌ها و فیبرهای پلی استر می‌باشد، و تبدیل به اتیل بنزن که در تهیه پلی استایرن مهم می‌باشد؛ اشاره کرد [1].

به لحاظ تجاری، اتیلن از طریق شکست حرارتی³ مایعات گاز طبیعی⁴ (NGLs) یا برش‌های نفت خام در حضور بخار تولید می‌شود. در شکست حرارتی از دماهای بسیار بالا استفاده می‌شود و از طرفی هزینه جداسازی و خالص سازی محصولات بسیار بالا است. این عامل محرک اقتصادی لازم را برای بررسی مجدد اثر فناوری‌های جدید مثل واکنش‌های هیدروژن‌زدایی⁵ کاتالیستی در راکتورهای غشائی کاتالیستی⁶ برای غلبه بر مشکلات عملیاتی مربوط به دمای بالا، مسائل مربوط به جداسازی و خالص سازی در فناوری رایج تولید اتیلن، فراهم می‌آورد [2].

2-1 راکتورهای غشائی

راکتورهای غشایی طی چند دهه اخیر در فرآیندهای شیمیایی مورد توجه خاصی بوده‌اند. در راکتورهای غشایی سعی بر این است که دو مرحله واکنش و جداسازی، به صورت هم زمان انجام گیرد.

¹ Basic Chemicals

² Chlorination

³ Thermal Cracking

⁴ Natural Gas Liquids

⁵ Dehydrogenation

⁶ Catalytic Membrane Reactor

یعنی واکنش شیمیایی در محیطی با حضور غشاء انجام شود و در حین انجام واکنش، جداسازی نیز صورت گیرد. از مزیت‌های راکتورهای غشایی، پیشرفت واکنش‌های تعادلی به دلیل خروج محصول، قابلیت کنترل غلظت مواد در حین انجام واکنش و نیز کاهش حجم تجهیزات فرآیندی به دلیل انجام جداسازی در همان مرحله انجام واکنش، می باشد [3]. از دیگر ویژگی‌های راکتورهای غشایی بهبود یافتن راندمان و گزینش پذیری تولید محصول مطلوب و هزینه‌ی کم، را می توان نام برد [4].

3-1 مطالعات انجام شده روی راکتورهای غشایی

راکتورهای غشایی کاتالیستی پتانسیل بالایی برای بهبود دادن عملکرد واکنش از قبیل بهبود میزان تبدیل و میزان گزینش پذیری در مقایسه با راکتورهای بستر ثابت دارند. مهمترین حسن راکتورهای غشایی کاتالیستی این است که سدهای ترمودینامیکی¹ مربوط به واکنش های برگشت پذیر² را می توانند از طریق حذف یک یا چند تا از محصولات واکنش از طریق غشاء، از بین ببرند که باعث می شود که میزان تبدیل افزایش پیدا کند. مهمترین واکنش هایی که در راکتورهای غشایی صورت می گیرد را می توان به موارد زیر تقسیم بندی کرد :

- واکنش های هیدروژن زدایی

- واکنش های تولید هیدروژن

- واکنش های هیدروژن دهی³

- واکنش های اکسیداسیون⁴

¹ Equilibrium Constraint

² Reversible

³ Hydrogenation

⁴ Oxidation

محاسن زیاد راکتورهای غشائی باعث می‌شود که در بررسی‌های محققان بسیار مورد استفاده قرار گیرند. اکثر تحقیقات انجام شده بر روی راکتورهای غشائی به بررسی‌های آزمایشگاهی راکتور غشائی، بهینه کردن شرایط غشاء، بررسی اثرات فلزات مختلف بر روی عملکرد غشاء و محاسبه میزان تراوایی غشاء و ... متمرکز شده است.

مدلسازی راکتورهای غشائی کاتالیستی نیز موضوع برخی از تحقیق‌ها بوده است. اکثر تحقیق‌های صورت گرفته در این خصوص بر روی مدل یک بعدی¹ صورت گرفته است. در مدل یک بعدی به منظور ساده شدن مسئله، تنها تغییرات غلظت در جهت محوری² در نظر گرفته می‌شود. تحقیقات کمتری نیز بر روی مدل‌سازی دو بعدی³ صورت گرفته است، که در آن تغییرات غلظت در هر دو جهت شعاعی⁴ و محوری، در نظر گرفته می‌شود [5].

گستره وسیع استفاده از راکتورهای غشائی در فرایندهای شیمیایی و واکنش‌ها باعث شده است که طیف وسیعی از تحقیقات بر روی آن صورت گیرد. در این بخش به بررسی جزئی برخی از تحقیقات صورت گرفته بر روی مدلسازی راکتورهای غشائی و مهم‌ترین نتیجه حاصل از آن تحقیق می‌پردازیم.

واکنش ریفرمینگ⁵ یکی از واکنش‌هایی است که برای تولید هیدروژن مورد استفاده قرار می‌گیرد. لذا استفاده از راکتورهای غشائی برای این نوع واکنش و جداسازی همزمان هیدروژن تولیدی می‌تواند محققان را به استفاده از این راکتور ترغیب کند. دی فالکو⁶ و همکارانش در سال 2007 به مدلسازی دو بعدی واکنش ریفرمینگ اتان پرداخته‌اند و نتایج مدلسازی در راکتور غشائی را با نتایج مدلسازی در راکتور لوله‌ای⁷ مقایسه کرده‌اند. آنها مهم‌ترین حسن استفاده از راکتور غشائی را تبدیل بیشتر اتان نسبت

¹ One-Dimension

² Axial

³ 2-Dimension

⁴ Radial

⁵ Reforming

⁶ De Falco

⁷ Tubular Reactor

به راکتور لوله ای و همچنین تولید هیدروژن اضافی عنوان کرده‌اند. تیمرسما¹ نیز در سال 2006 به بررسی واکنش ریفرمینگ متان برای تولید هیدروژن فوق خالص² پرداخته است. نتایج مدلسازی دو بعدی حاصل از کار تیمرسما نیز نشان دهنده بهبود در میزان هیدروژن تولیدی و کاهش منوکسیدکربن خروجی حاصل از واکنش است [6].

واکنش دیگری که همانند ریفرمینگ مورد توجه دیگر محققان بوده است واکنش هیدروژن زدایی آلکان‌ها می‌باشد. در این میان واکنش‌های اکسایشی³ هیدروژن زدایی توجه بیشتری را نسبت به واکنش‌های هیدروژن زدایی غیر اکسایشی⁴ به خود جلب کرده است. آسابومرونگر⁵ و همکاران اش در سال 2000 به مدلسازی واکنش هیدروژن زدایی اکسایشی نرمال بوتان پرداخته‌اند و گزارش کرده‌اند که با افزایش دما میزان گزینش پذیری محصول بیشتر می‌شود.

هوگس⁶ و همکارانش نیز در سال 2001 به بررسی مدلسازی هیدروژن زدایی اکسایشی پروپان پرداخته‌اند. هدف عمده‌ی آنها بررسی اثرات مشخصات هندسی راکتور بر میزان تبدیل پروپان بوده است. نتایج آنها نشان می‌دهد که با افزایش شعاع راکتور میزان تبدیل پروپان و گزینش پذیری پروپیلن کاهش می‌یابد [7].

شلیپوا⁷ و همکاران اش نیز در سال 2011 به بررسی مدلسازی دو بعدی واکنش هیدروژن زدایی اکسایشی پروپان درون راکتورهای غشائی پرداخته‌اند. آنها نتایج حاصل از مدلسازی درون راکتور غشائی را با نتایج مدلسازی درون راکتور لوله ای مقایسه کرده‌اند و گزارش کرده‌اند که میزان تبدیل پروپان هنگام استفاده از راکتورهای غشائی نسبت به راکتور لوله ای از 41% به 76% و میزان گزینش پذیری محصول نیز از 86/8% به 96/2% افزایش می‌یابد [8].

¹ Tiemersma

² Ultra-Pure

³ Oxidative

⁴ Non- Oxidative

⁵ Assabumrungrat

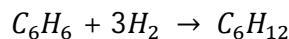
⁶ Hughes

⁷ Shelepova

از جمله تحقیقاتی که بر روی مدلسازی در راکتورهای غشائی صورت گرفته و اتان نیز در آن دخیل بوده می‌توان به بررسی‌های زانفیر¹ و همکاران در سال 2001 اشاره کرد که به مدلسازی هیدروژن زدایی اکسایشی اتان درون راکتورهای غشائی پرداخته اند و جنبه‌های حاصل از احتراق هیدروژن در سمت پوسته را مورد بررسی قرار داده اند [9].

گوبینا² و همکاران اش نیز در سال 1995 به بررسی هیدروژن زدایی از اتان، درون راکتور غشائی در دو حالتی که واکنش مصرف هیدروژن در سمت پوسته اتفاق می افتد با حالتی که این واکنش اتفاق نمی‌افتد، پرداخته اند. آنها نتایج حاصل از مدلسازی دو بعدی خود را با استفاده از روش نظم متعامد³ حل نموده و گزارش کرده‌اند که افزایش زمان تماس، سبب افزایش میزان تبدیل اتان شده است. خوراک آنها ترکیبی از اتان به همراه نیتروژن بوده است و نتایج آنها نشان می‌دهد که انجام واکنش برای مصرف هیدروژن نفوذی در سمت پوسته، سبب تسهیل شدن تراوایی هیدروژن از طریق غشاء می‌شود هر چند که این نتیجه با نتایج آزمایشگاهی حاصل از تحقیقاتشان، مطابقت زیادی نداشته است [10].

از دیگر تحقیقات در این زمینه می‌توان به بررسی‌های آباشار⁴ و همکارانش در سال 2005 اشاره کرد که به بررسی تولید اتیلن و سیکلو هگزان درون راکتور غشائی پرداخته اند. خوراک آنها شامل اتان و بنزن وارد راکتور غشائی شده و واکنش‌های زیر در آن صورت می‌گیرد [1].



در حقیقت در این حالت هیدروژن تولیدی از واکنش هیدروژن زدایی اتان علاوه بر این که با عبور از غشاء به پیشروی تعادل کمک می‌کند با ترکیب شدن با بنزن نیز به جابه جا شدن تعادل ترمودینامیکی به سمت تولید محصول اتان منجر خواهد شد.

¹ Zanfir

² Gobina

³ Orthogonal Collocation

⁴ Abashar